Ігор Романович Зачек
Роман Романович Левицький

До теорії релаксаційних явищ в сегнетоактивних сполуках сім'ї KD_2PO_4. Метод нерівноважного статистичного оператора

Роботу отримано 29 грудня 2010 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділом теорії модельних спінових систем

Виготовлено при ІФКС НАН України

Національна академія наук України

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP–10–21U

І.Р.Зачек*, Р.Р.Левицький

ДО ТЕОРІЇ РЕЛАКСАЦІЙНИХ ЯВИЩ В СЕГНЕТОАКТИВНИХ СПОЛУКАХ СІМ'Ї KD_2PO_4. МЕТОД НЕРІВНОВАЖНОГО СТАТИСТИЧНОГО ОПЕРАТОРА

*Національний університет “Львівська Політехніка”, 79013 Львів, вул. Бандери, 12

ЛЬВІВ

УДК: 538.953, 538.956, 537.2, 537.9

PACS: 77.22.Ch, 77.22.Gm, 77.84.Fa

До теорії релаксаційних явищ в сегнетоактивних сполуках сім'ї KD_2PO_4. Метод нерівноважного статистичного оператора

І.Р.Зачек, Р.Р.Левицький

Анотація. На основі кінетичного рівняння, отриманого в рамках методу нерівноважного статистичного оператора в наближенні чотиричастинкового кластера знайдено системи рівнянь для залежних від часу функцій розподілу дейтронів для сегнетоелектриків типу KD_2PO_4 та антисегнетоелектриків типу $ND_4D_2PO_4$ при врахуванні п'єзоелектричного зв'язку та взаємодії дейтронів із зовнішніми електричними полями E_3 і E_1.

To the theory of relaxational phenomena in KD_2PO_4 family ferroactive compounds. Nonequilibrium statistical operator method

I.R.Zachek, R.R.Levitsky

Abstract. On the basis of kinetic equation, obtained within nonequilibrium statistical operator method within the four-particle cluster approximation we obtained the system of equations for time-dependent distribution functions of deutrons of KD_2PO_4 type ferroelectrics and of $ND_4D_2PO_4$ type antiferroelectrics, taking into account piezoelectric coupling and interaction of deuterons with external electric fields E_3 and E_1.

Подається в Журнал фізичних досліджень
Submitted to Journal of Physical studies

1. Вступ

Наприкінці шістдесятих років минулого століття центр ваги теоретичних та експериментальних досліджень сегнетоактивних сполук змістився до проблеми динамічних явищ (див. [1–4]). В області низьких частот велика увага приділялась дослідженням дисперсії діелектричної проникності сегнетоактивних сполук, яка дає важливу інформацію про механізми фазових переходів та особливості їх низькочастотної динаміки.

При інтерпретації результатів експериментального дослідження дисперсії діелектричної проникності в сегнетоактивних сполуках типу лад-безлад, в тому числі і сім'ї KH_2PO_4, використовувались в основному феноменологічні моделі (див. [1–4]). В багатьох випадках були виявлені протиріччя між феноменологічною теорією та експериментом, особливо для тих сегнетоактивних матеріалів, у яких спостерігались нелінійності в температурній залежності їх динамічних характеристик. Окрім того, феноменологічні теорії не дають можливості вияснити мікроскопічну природу дисперсії проникності та адекватно описати вплив різноманітних факторів на характер її температурної і частотної залежностей.

У зв'язку з цим важливими були дослідження динамічних характеристик сегнетоактивних сполук на основі методу рівнянь Блоха [5]. В роботах [6–9] за допомогою цього методу вивчались динамічні властивості сегнетоелектриків типу лад-безлад, у тому числі і з водневими зв'язками типу KH_2PO_4, на основі простих моделей цих кристалів. Було отримано задовільний опис динамічних характеристик KH_2PO_4 в парафазі. Пізніше [10, 11] була врахована реальна структура сегнетоактивних сполук сім'ї KH_2PO_4 і протон-граткова взаємодія; в рамках методу рівнянь Блоха було розраховано часи релаксації та поздовжні і поперечні компоненти тензора динамічної діелектричної проникності сегнетоелектриків типу KH_2PO_4 і антисегнетоелектриків типу $NH_4H_2PO_4$.

Недавно [12] на основі модифікованої моделі протонного впорядкування з врахуванням тунелювання протонів на водневих зв'язках та лінійних за деформаціями ε_6, ε_4 і ε_5 внесків в енергію протонної системи в наближенні молекулярного поля розраховано термодинамічні, діелектричні, п'єзоелектричні, пружні, а в рамках методу Блоха і динамічні характеристики сегнетоелектриків типу KH_2PO_4.

Слід відзначити, що метод Блоха дає змогу врахувати ефекти тунелювання, але грунтується на наближенні середнього поля, неадекватному для цих кристалів. В той же час запропонована в [12] теорія дозволяє досягнути доброї згоди теорії з експериментом для фізичних характеристик KH_2PO_4 і RbH_2PO_4, однак лише в парафазі.

Більшість робіт з теорії релаксаційних явищ у кристалах сім'ї KH_2PO_4 грунтується на стохастичній моделі Глаубера [13]. Вперше цей метод застосовано авторами роботи [2], в якій в НЧК з врахуванням короткосяжних кореляцій дейтронів біля тетраедрів PO_4 (але без далекодії) знайдено часи релаксації та поздовжню динамічну діелектричну проникність цих сполук у випадку парафази. Отримані в цій роботі результати з експериментом не порівнювались.

Пізніше авторами робіт [3, 14–18] було запропоновано єдиний підхід для опису спостережуваних на експерименті термодинамічних і динамічних характеристик сегнетоактивних сполук сім'ї KH_2PO_4. Ними була запропонована більш послідовна динамічна модель дейтерованих кристалів цього типу, яка грунтується на стохастичній моделі Глаубера. В рамках цієї моделі в НЧК з врахуванням короткосяжних конфігураційних взаємодій між дейтронами поблизу тетраедрів PO_4 та ефективних далекосяжних взаємодій між ними були розраховані і досліджені часи релаксації, поздовжня і поперечна компоненти тензора статичної і комплексної діелектричної проникностей цих сполук. Крім того, в НЧК для них було отримано і досліджено вільну енергію, теплоємність, рівняння для температур фазових переходів та параметрів порядку. Було показано, що при належному виборі параметрів теорії навіть без врахування тунелювання має місце задовільний кількісний опис експериментальних даних для регулярних і частково дейтерованих сегнетоактивних сполук сім'ї KH_2PO_4.

Слід, однак, відзначити, що метод Глаубера має ряд недоліків. Перш за все – це неочевидність і неоднозначність основного рівняння теорії, в якому еволюція системи, яка досліджується, описується набором введених феноменологічних ймовірностей переорієнтації псевдоспінів, а не з допомогою квантово-механічних рівнянь руху. При цьому втрачається можливість отримання явних виразів для кінетичних параметрів та середніх значень недіагональних операторів. Для дослідження релаксаційних явищ в сегнетоактивних та магнітних матеріалах одним з найбільш ефективних методів є метод кінетичних рівнянь [19–32]. При цьому, в даному напрямку є цілий ряд ефективних підходів для вивчення динамічних явищ. Відзначимо, що для опису релаксаційних процесів в різноманітних матеріалах широке використання мають методи загальної теорії необоротніх процесів, розвиненої Д.М. Зубарєвим [29]. Метод нерівноважного статистичного оператора (НСО), дозволяє при наявності в досліджуваній системі малого параметра отримати узагальнені кінетичні рівняння [27, 28, 30–32]. Слід відзначити, що цей метод в роботах [30–32] вже використовувався для дослідження поведінки сильно нерівноважного ізінгівського магнетика, який знаходився в контакті з термостатом і при наявності сильного зовнішнього змінного поля. В роботі [33] цей метод було використано для опису динамічних характеристик квазіодномірних сегнетоелектриків з водневими зв'язками.

Сегнетоелектрики типу KH_2PO_4 у парафазі кристалізуються в класі $\bar{4} \cdot m$ тетрагональної сингонії (просторова група $I\bar{4}2d$ з нецентросиметричною точковою групою D_{2d}) і тому вони володіють п'єзоелектричними властивостями. При прикладанні відповідних електричних полів і зсувних напруг певної симетрії є можливість вивчати роль п'єзоелектричних взаємодій у фазовому переході та їх вплив на фізичні характеристики цих кристалів.

Фундаментальні результати для деформованих сегнетоактивних сполук типу KH_2PO_4 були отримані в роботах [34–48]. В цих роботах вперше було модифіковано модель протонного впорядкування для сегнетоелектриків типу KD_2PO_4 та антисегнетоелектриків типу $ND_4D_2PO_4$ шляхом врахування лінійного за деформацією ε_6, ε_4 і ε_5 внесків в енергію протонної системи. Було грунтовно досліджено особливості фазових переходів в цих кристалах на основі модифікованих моделей та розраховані їх поздовжні і поперечні діелектричні, п'єзоелектричні і пружні характеристики. При належному виборі параметрів теорії було отримано добрий кількісний опис наявних для сегнетоактивних сполук сім'ї KH_2PO_4 експериментальних даних.

В рамках модифікованих протонних моделей для цих кристалів на основі методу Глаубера з врахуванням динаміки п'єзоелектричної деформації вивчено динамічний діелектричний відгук. Явно описано явище п'єзоелектричного резонансу і НВЧ дисперсії.

В даній роботі для опису динамічних властивостей сегнетоактивних сполук сім'ї KH_2PO_4 на основі їх модифікованих моделей, слідуючи [33], використано метод НСО Д.М. Зубарєва. В рамках цього методу отримано замкнені системи рівнянь для залежних від часу функцій розподілу для кристалів KD_2PO_4 і $ND_4D_2PO_4$ при наявності електричних полів E_3 і E_1.

2. Системи рівнянь для залежних від часу функцій розподілу дейтронів кристалу KD_2PO_4 при прикладанні зовнішнього поля E_3

Динамічні властивості сегнетоелектриків типу KD_2PO_4 будемо розглядати, використовуючи метод нерівноважного статистичного оператора (НСО), який розвинутий Зубарєвим у роботі [29]. Цей метод використовувався в [30–32] для дослідження поведінки сильно нерівноважного ізингівського магнетика, який знаходиться в контакті з термостатом і на нього діє зовнішнє електричне поле.

Кінетичне рівняння, що визначає динаміку псевдоспінових операторів, має такий вигляд [30–32]:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{P}_m\rangle = -\sum_{qf}\sum_{\mu\alpha}\left\{Q^{-}_{qf\mu\alpha}(\hat{P}_m) + th\frac{\beta\Omega^\alpha_\mu}{2}Q^{+}_{qf\mu\alpha}(\hat{P}_m)\right\}K^\alpha_\mu, \qquad (2.1)$$

де використані такі позначення:

$$Q^{\mp}_{qf\mu\alpha}(\hat{P}_m) = \langle[\hat{P}_m S^{-\alpha}_{qf}(\Omega^\alpha_\mu)], S^\alpha_{qf}(\Omega^\alpha_\mu)]^{\mp}\rangle_q, \qquad (2.2)$$
$$K^\alpha_\mu = \int\limits_0^\infty dte^{-\varepsilon t}\cos\bigl(\Omega^\alpha_\mu t\bigr)\mathrm{Re}[\langle\bar{u}^{-\alpha}(t)\bar{u}^\alpha\rangle_q],$$

а $\bar{u}^{-\alpha}(t)$, $\bar{u}^\alpha$ – оператори, що залежать від змінних гратки термостата, Ω^α_μ – власні значення чотиричастинкового гамільтоніана [38]

$$\hat{H}^{(4)}_{q6} = -\sum_{f=1}^{4}\frac{z_6}{\beta}\frac{\sigma_{qf}}{2} + \frac{\varepsilon_6}{4}(-\delta_{s6}+2\delta_{16})\sum_{f=1}^{4}\frac{\sigma_{qf}}{2} - \qquad (2.3)$$
$$-\varepsilon_6(\delta_{s6}+2\delta_{16})\left(\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}+\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2}+\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2}+\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2}\right)+$$
$$+(V+\delta_{a6}\varepsilon_6)\left(\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q2}}{2}+\frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2}\right)+(V-\delta_{a6}\varepsilon_6)\left(\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}+\frac{\sigma_{q4}}{2}\frac{\sigma_{q1}}{2}\right)+$$
$$+U\left(\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}+\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2}\right)+\Phi\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2},$$

де

$$z_6 = \beta(-\Delta^c + 2\nu_c\eta^{(1)}(6) - 2\psi_6\varepsilon_6 + \mu_3E_3), \quad (\beta = \frac{1}{k_BT}).$$

і одночастинкових гамільтоніанів

$$\hat{H}^{(1)}_{qf} = -\frac{\bar{z}_6}{\beta}\frac{\sigma_{qf}}{2}, \qquad (2.4)$$

де використані такі позначення:

$$z_6 = \beta\bigl[-\Delta^c + 2\nu\eta^{(1)}(6) - 2\psi_6\varepsilon_6 + \mu_3E_3\bigr),$$
$$\bar{z}_6 = -\beta\Delta^c + z_6,$$

а $\sigma_{qf} = 2S^z_{qf}$ – оператор z-компоненти псевдоспіна дейтрона, який знаходиться в q-ій комірці на f-му зв'язку.

Для розрахунку виразу (2.2) визначимо закон еволюції псевдоспінових операторі $\sigma^\alpha_{qf}(t)$:

$$\sigma^\alpha_{qf}(t) = \bigl[i\hat{H}^{(4)}_{q6}t\bigr]\sigma^\alpha_{qf}\bigl[-i\hat{H}^{(4)}_{q6}t\bigr] =$$
$$= \sigma^\alpha_{qf} + it\bigl[\hat{H}^{(4)}_{q6},\sigma^\alpha_{qf}\bigr] + \frac{1}{2!}(it)^2\bigl[\hat{H}^{(4)}_{q6},[\hat{H}^{(4)}_{q6},\sigma^\alpha_{qf}]\bigr] + \ldots \quad (2.5)$$

Використовуючи перестановочні співвідношення спінових операторів, розраховуємо комутатори, що входять у (2.5). В результаті закон еволюції псевдоспінових операторів можна записати у такому вигляді:

$$\sigma^\alpha_{qf}(t) = \sigma^\alpha_{qf}\exp(-i\alpha t\bar{\Omega}^z_f), \quad (\alpha = 0,\pm1), \qquad (2.6)$$

де

$$\bar{\Omega}^z_1 = -\Bigl[(V_s+\delta_{a6}\varepsilon_6)\frac{\sigma_{q2}}{2} + (V_s-\delta_{a6}\varepsilon_6)\frac{\sigma_{q4}}{2} + U_s\frac{\sigma_{q3}}{2} + \Phi_s\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} -$$
$$-\varepsilon_6(\delta_{s6}+2\delta_{16})\left(\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}+\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2}+\frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2}\right)+\varepsilon_6\left(-\frac{\delta_{s6}}{4}+\frac{\delta_{16}}{2}\right)-\frac{z_6}{\beta}\Bigr],$$
$$\bar{\Omega}^z_2 = -\Bigl[(V_s+\delta_{a6}\varepsilon_6)\frac{\sigma_{q1}}{2} + (V_s-\delta_{a6}\varepsilon_6)\frac{\sigma_{q3}}{2} + U_s\frac{\sigma_{q4}}{2} + \Phi_s\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} -$$
$$-\varepsilon_6(\delta_{s6}+2\delta_{16})\left(\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2}+\frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2}+\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}\right)+\varepsilon_6\left(-\frac{\delta_{s6}}{4}+\frac{\delta_{16}}{2}\right)-\frac{z_6}{\beta}\Bigr],$$
$$\bar{\Omega}^z_3 = -\Bigl[(V_s+\delta_{a6}\varepsilon_6)\frac{\sigma_{q4}}{2} + (V_s-\delta_{a6}\varepsilon_6)\frac{\sigma_{q2}}{2} + U_s\frac{\sigma_{q1}}{2} + \Phi_s\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} - \quad (2.7)$$
$$-\varepsilon_6(\delta_{s6}+2\delta_{16})\left(\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q2}}{2}+\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2}+\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2}\right)+\varepsilon_6\left(-\frac{\delta_{s6}}{4}+\frac{\delta_{16}}{2}\right)-\frac{z_6}{\beta}\Bigr],$$
$$\bar{\Omega}^z_4 = -\Bigl[(V_s+\delta_{a6}\varepsilon_6)\frac{\sigma_{q3}}{2} + (V_s-\delta_{a6}\varepsilon_6)\frac{\sigma_{q1}}{2} + U_s\frac{\sigma_{q2}}{2} + \Phi_s\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} -$$
$$-\varepsilon_6(\delta_{s6}+2\delta_{16})\left(\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q2}}{2}+\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}+\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}\right)+\varepsilon_6\left(-\frac{\delta_{s6}}{4}+\frac{\delta_{16}}{2}\right)-\frac{z_6}{\beta}\Bigr].$$

Аналогічно отримуємо закон еволюції псевдоспінових операторів в одночастинковому наближенні:

$$\sigma^\alpha_{qf}(t) = \sigma^\alpha_{qf}\exp(-i\alpha t\bar{\Omega}^z), \qquad (2.8)$$

де $\bar{\Omega}^z = -\frac{\bar{z}}{\beta}$.

Враховуючи, що псевдоспінові оператори σ_{qf} набувають значення ± 1, власні частоти гамільтоніана (2.3) набувають вигляду:

$$
\begin{aligned}
&\Omega^z_{\substack{1\\2}} = \pm w + (\delta_{s6}+\delta_{16})\varepsilon_6 + \frac{z_6}{\beta}, \quad \Omega^z_{\substack{3\\4}} = \pm(w-w_1) - \delta_{16}\varepsilon_6 + \frac{z_6}{\beta},\\
&\Omega^z_{\substack{5\\6}} = \pm(\varepsilon - w) - (\delta_{a6}+\delta_{16})\varepsilon_6 + \frac{z_6}{\beta}, \qquad (2.9)\\
&\Omega^z_{\substack{7\\8}} = \pm(\varepsilon - w) + (\delta_{a6}-\delta_{16})\varepsilon_6 + \frac{z_6}{\beta}.
\end{aligned}
$$

Тут враховано, що

$$
V_s = -\frac{1}{2}w_1, \quad U_s = -\varepsilon + \frac{1}{2}w_1, \quad \Phi_s = 4\varepsilon - 8w + 2w_1,
$$

де $\varepsilon = \varepsilon_a - \varepsilon_s$, $w = \varepsilon_1 - \varepsilon_s$, $w_1 = \varepsilon_0 - \varepsilon_s$, а ε_s, ε_a, ε_1, ε_0 – енергії дейтронних конфігурацій поблизу тетраедра PO_4 при відсутності деформації ε_6.

Перейдемо в (2.6) до частотного представлення

$$
\begin{aligned}
\sigma^\alpha_{qf}(t) &= \sigma^\alpha_{qf} e^{-it\alpha\bar{\Omega}^z_f} = \sum_{\mu=1}^{8} \sigma^\alpha_{qf}(\Omega^z_\mu) e^{-it\alpha\Omega^z_\mu} =\\
&= \sigma^\alpha_{qf} \sum_{\mu=1}^{8} R_{qf}(\Omega^z_\mu) e^{-it\alpha\Omega^z_\mu}, \qquad (2.10)
\end{aligned}
$$

де використано такі позначення:

$$
\begin{aligned}
R_{q1}(\Omega^z_{\substack{1\\2}}) &= \frac{1}{8}(1\pm\sigma_{q2}\pm\sigma_{q3}\pm\sigma_{q4}+\sigma_{q2}\sigma_{q3}+\sigma_{q2}\sigma_{q4}+\sigma_{q3}\sigma_{q4}\pm\sigma_{q2}\sigma_{q3}\sigma_{q4}),\\
R_{q1}(\Omega^z_{\substack{3\\4}}) &= \frac{1}{8}(1\mp\sigma_{q2}\pm\sigma_{q3}\mp\sigma_{q4}-\sigma_{q2}\sigma_{q3}+\sigma_{q2}\sigma_{q4}-\sigma_{q3}\sigma_{q4}\pm\sigma_{q2}\sigma_{q3}\sigma_{q4}),\\
R_{q1}(\Omega^z_{\substack{5\\6}}) &= \frac{1}{8}(1+\sigma_{q2}\mp\sigma_{q3}-\sigma_{q4}+\sigma_{q2}\sigma_{q3}+\sigma_{q2}\sigma_{q4}+\sigma_{q3}\sigma_{q4}\pm\sigma_{q2}\sigma_{q3}\sigma_{q4}),\\
R_{q1}(\Omega^z_{\substack{7\\8}}) &= \frac{1}{8}(1-\sigma_{q2}\mp\sigma_{q3}+\sigma_{q4}\pm\sigma_{q2}\sigma_{q3}-\sigma_{q2}\sigma_{q4}\mp\sigma_{q3}\sigma_{q4}\pm\sigma_{q2}\sigma_{q3}\sigma_{q4}),\\
R_{q2}(\Omega^z_{\substack{1\\2}}) &= \frac{1}{8}(1\pm\sigma_{q1}\pm\sigma_{q3}\pm\sigma_{q4}+\sigma_{q1}\sigma_{q3}+\sigma_{q1}\sigma_{q4}+\sigma_{q3}\sigma_{q4}\pm\sigma_{q1}\sigma_{q3}\sigma_{q4}),\\
R_{q2}(\Omega^z_{\substack{3\\4}}) &= \frac{1}{8}(1\mp\sigma_{q1}\mp\sigma_{q3}\pm\sigma_{q4}+\sigma_{q1}\sigma_{q3}-\sigma_{q1}\sigma_{q4}-\sigma_{q3}\sigma_{q4}\pm\sigma_{q1}\sigma_{q3}\sigma_{q4}),\\
R_{q2}(\Omega^z_{\substack{5\\6}}) &= \frac{1}{8}(1-\sigma_{q1}+\sigma_{q3}\mp\sigma_{q4}-\sigma_{q1}\sigma_{q3}\pm\sigma_{q1}\sigma_{q4}\mp\sigma_{q3}\sigma_{q4}\pm\sigma_{q1}\sigma_{q3}\sigma_{q4}),
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
R_{q2}(\Omega^z_{\substack{7\\8}}) &= \frac{1}{8}(1+\sigma_{q1}-\sigma_{q3}\mp\sigma_{q4}-\sigma_{q1}\sigma_{q3}\mp\sigma_{q1}\sigma_{q4}\pm\sigma_{q3}\sigma_{q4}\pm\sigma_{q1}\sigma_{q3}\sigma_{q4}),\\
R_{q3}(\Omega^z_{\substack{1\\2}}) &= \frac{1}{8}(1\pm\sigma_{q1}\pm\sigma_{q2}\pm\sigma_{q4}+\sigma_{q1}\sigma_{q2}+\sigma_{q1}\sigma_{q4}+\sigma_{q2}\sigma_{q4}\pm\sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q4}),\\
R_{q3}(\Omega^z_{\substack{3\\4}}) &= \frac{1}{8}(1\pm\sigma_{q1}\mp\sigma_{q2}\mp\sigma_{q4}-\sigma_{q1}\sigma_{q2}-\sigma_{q1}\sigma_{q4}+\sigma_{q2}\sigma_{q4}\pm\sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q4}),\\
R_{q3}(\Omega^z_{\substack{5\\6}}) &= \frac{1}{8}(1\mp\sigma_{q1}+\sigma_{q2}-\sigma_{q4}\mp\sigma_{q1}\sigma_{q2}\pm\sigma_{q1}\sigma_{q4}-\sigma_{q2}\sigma_{q4}\pm\sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q4}),\\
R_{q3}(\Omega^z_{\substack{7\\8}}) &= \frac{1}{8}(1\mp\sigma_{q1}-\sigma_{q2}+\sigma_{q4}\pm\sigma_{q1}\sigma_{q2}\mp\sigma_{q1}\sigma_{q4}-\sigma_{q2}\sigma_{q4}\pm\sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q4}),\\
R_{q4}(\Omega^z_{\substack{1\\2}}) &= \frac{1}{8}(1\pm\sigma_{q1}\pm\sigma_{q2}\pm\sigma_{q3}+\sigma_{q1}\sigma_{q2}+\sigma_{q2}\sigma_{q3}+\sigma_{q1}\sigma_{q3}\pm\sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q3}),\\
R_{q4}(\Omega^z_{\substack{3\\4}}) &= \frac{1}{8}(1\mp\sigma_{q1}\pm\sigma_{q2}\mp\sigma_{q3}-\sigma_{q1}\sigma_{q2}-\sigma_{q2}\sigma_{q3}-\sigma_{q1}\sigma_{q3}\pm\sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q3}),\\
R_{q4}(\Omega^z_{\substack{5\\6}}) &= \frac{1}{8}(1+\sigma_{q1}\mp\sigma_{q2}-\sigma_{q3}\mp\sigma_{q1}\sigma_{q2}\pm\sigma_{q2}\sigma_{q3}-\sigma_{q1}\sigma_{q3}\pm\sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q3}),\\
R_{q4}(\Omega^z_{\substack{7\\8}}) &= \frac{1}{8}(1-\sigma_{q1}\mp\sigma_{q2}+\sigma_{q3}\pm\sigma_{q1}\sigma_{q2}\mp\sigma_{q2}\sigma_{q3}-\sigma_{q1}\sigma_{q3}\pm\sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q3}).
\end{aligned}
\qquad (2.11)
$$

Вибір операторів скороченого опису $\hat{P}_m$, що входять в кінетичне рівняння, визначається властивостями фізичної системи, що досліджується, і видом її гамільтоніана. Беручи до уваги (2.3), оператори $\hat{P}_m$ мають такий вигляд:

$$
\hat{P}_{q\{f\}} = \prod_{f\{1\ldots 4\}} \sigma_{qf}. \qquad (2.12)
$$

Для функцій розподілу дейтронів кристалу KD_2PO_4 при наявності поля E_3 властива наступна симетрія:

$$
\begin{aligned}
&\eta^{(1)z} = \langle\sigma_{q1}\rangle = \langle\sigma_{q2}\rangle = \langle\sigma_{q3}\rangle = \langle\sigma_{q4}\rangle =\\
&= \frac{1}{D_6}\big[\mathrm{sh}(2z_6+\beta\delta_{s6}\varepsilon_6) + 2b\,\mathrm{sh}(z_6-\beta\delta_{16}\varepsilon_6)\big],\\
&\eta^{(3)z} = \langle\sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q3}\rangle = \langle\sigma_{q1}\sigma_{q3}\sigma_{q4}\rangle = \langle\sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q4}\rangle = \langle\sigma_{q2}\sigma_{q3}\sigma_{q4}\rangle =\\
&= \frac{1}{D_6}\big[\mathrm{sh}(2z_6+\beta\delta_{s6}\varepsilon_6) - 2b\,\mathrm{sh}(z_6-\beta\delta_{16}\varepsilon_6)\big], \qquad (2.13)\\
&\eta^{(2)z}_1 = \langle\sigma_{q2}\sigma_{q3}\rangle = \langle\sigma_{q1}\sigma_{q4}\rangle = \frac{1}{D_6}\Big[\mathrm{ch}(2z_6+\beta\delta_{s6}\varepsilon_6) - aa_6 + \frac{a}{a_6} - d\Big],\\
&\eta^{(2)z}_2 = \langle\sigma_{q1}\sigma_{q2}\rangle = \langle\sigma_{q3}\sigma_{q4}\rangle = \frac{1}{D_6}\Big[\mathrm{ch}(2z_6+\beta\delta_{s6}\varepsilon_6) + aa_6 - \frac{a}{a_6} - d\Big],\\
&\eta^{(2)z}_3 = \langle\sigma_{q1}\sigma_{q3}\rangle = \langle\sigma_{q2}\sigma_{q4}\rangle = \frac{1}{D_6}\Big[\mathrm{ch}(2z_6+\beta\delta_{s6}\varepsilon_6) - aa_6 - \frac{a}{a_6} + d\Big],
\end{aligned}
$$

$\eta^{(4)z} = \langle \sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q3}\sigma_{q4}\rangle.$

Здійснивши розрахунок виразів $Q^{\mp}_{qf\mu\alpha}(\hat{P}_m)$, представимо кінетичне рівняння (2.1) в наступному вигляді:

$$\frac{d}{dt}\langle \prod_{f\{1\ldots4\}} \sigma_{qf}\rangle = -2\sum_{\mu=1}^{8}\Bigg\{\langle \prod_{f\{1\ldots4\}}\sigma_{qf}\sum_{f\{1\ldots4\}}R_{qf}\big(\Omega^z_\mu\big)\rangle_q - $$

$$-Z_\mu\langle \prod_{f\{1\ldots4\}}\sigma_{qf}\sum_{f\{1\ldots4\}}\sigma_{qf}R_{qf}\big(\Omega^z_\mu\big)\rangle_q\Bigg\}K_\mu, \qquad (2.14)$$

де використано такі позначення:

$$Z_\mu = th\frac{\beta}{2}\Omega^z_\mu, \qquad (2.15)$$

$$K_\mu = K^{+1}_\mu + K^{-1}_\mu = \int\limits_0^\infty dte^{-\varepsilon t}\cos\big(\Omega^z_\mu t\big)\mathrm{Re}\big[\langle \bar{u}^-(t)\bar{u}^+\rangle_q + \langle \bar{u}^+(t)\bar{u}^-\rangle_q\big]. \qquad (2.16)$$

Як приклади, запишемо кінетичні рівняння для унарної, парної і тетрарної функцій розподілу:

$$\frac{d}{dt}\langle\sigma_{q1}\rangle = -2\sum_{\mu=1}^{8}\big[\langle\sigma_{q1}R_{q1}(\Omega^z_\mu)\rangle - Z_\mu\langle R_{q1}(\Omega^z_\mu)\rangle\big]k_\mu,$$

$$\frac{d}{dt}\langle\sigma_{q1}\sigma_{q2}\rangle = -2\sum_{\mu=1}^{8}\big[\langle\sigma_{q1}\sigma_{q2}\big[R_{q1}(\Omega^z_\mu)+R_{q2}(\Omega^z_\mu)\big]\rangle -$$

$$-Z_\mu\langle\sigma_{q1}R_{q2}(\Omega^z_\mu)+\sigma_{q2}R_{q1}(\Omega^z_\mu)\rangle\big]k_\mu,$$

$$\frac{d}{dt}\langle\sigma_{q2}\sigma_{q3}\sigma_{q4}\rangle = -2\sum_{\mu=1}^{8}\big[\langle\sigma_{q2}\sigma_{q3}\sigma_{q4}\big[R_{q2}(\Omega^z_\mu)+R_{q3}(\Omega^z_\mu)+R_{q4}(\Omega^z_\mu)\big] -$$

$$-Z_\mu\langle\sigma_{q3}\sigma_{q4}R_{q2}(\Omega^z_\mu)+\sigma_{q2}\sigma_{q4}R_{q3}(\Omega^z_\mu)+\sigma_{q2}\sigma_{q3}R_{q4}(\Omega^z_\mu)\rangle\big]K_\mu.$$

Враховуючи симетрії функцій розподілу (2.13), використовуючи кінетичне рівняння (2.14) з врахуванням (2.11), отримуємо наступну замкнену систему рівнянь для унарної, парних, потрійної і четвірної

функцій розподілу:

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}\eta^{(1)z}\\ \eta^{(3)z}\\ \eta^{(2)z}_1\\ \eta^{(2)z}_2\\ \eta^{(2)z}_3\\ \eta^{(4)z}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\bar{c}_{11} & \bar{c}_{12} & \bar{c}_{13} & \bar{c}_{14} & \bar{c}_{15} & \bar{c}_{16}\\ \bar{c}_{21} & \bar{c}_{22} & \bar{c}_{23} & \bar{c}_{24} & \bar{c}_{25} & \bar{c}_{26}\\ \bar{c}_{31} & \bar{c}_{32} & \bar{c}_{33} & \bar{c}_{34} & \bar{c}_{35} & \bar{c}_{36}\\ \bar{c}_{41} & \bar{c}_{42} & \bar{c}_{43} & \bar{c}_{44} & \bar{c}_{45} & \bar{c}_{46}\\ \bar{c}_{51} & \bar{c}_{52} & \bar{c}_{53} & \bar{c}_{54} & \bar{c}_{55} & \bar{c}_{56}\\ \bar{c}_{61} & \bar{c}_{62} & \bar{c}_{63} & \bar{c}_{64} & \bar{c}_{65} & \bar{c}_{66}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\eta^{(1)z}\\ \eta^{(3)z}\\ \eta^{(2)z}_1\\ \eta^{(2)z}_2\\ \eta^{(2)z}_3\\ \eta^{(4)z}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\bar{c}_1\\ \bar{c}_2\\ \bar{c}_3\\ \bar{c}_4\\ \bar{c}_5\\ \bar{c}_6\end{pmatrix}. \qquad (2.17)$$

Тут використані наступні позначення:

$$\bar{c}_{11} = -l + P^z_6 + Q^z_{61} + Q^z_{62}, \quad \bar{c}_{12} = -(n+m_1+m_2) + R^z_6,$$
$$\bar{c}_{13} = -q_1 + M^z_{61}, \quad c_{14} = -q_2 + M^z_{62}, \quad \bar{c}_{15} = -r + N^z_6, \quad \bar{c}_{16} = -p,$$
$$\bar{c}_{21} = -(n+m_1+m_2) + 2P^z_6 + 2Q^z_{61} + 2Q^z_{62} + 3R^z_6,$$
$$\bar{c}_{22} = -(3l + 2m_1 + 2m_2 + 2n) + P^z_6 + Q^z_{61} + Q^z_{62},$$
$$c_{23} = -(p + q_2 + r) + (N^z_6 + M^z_{62} + L^z_6),$$
$$\bar{c}_{24} = -(p + q_1 + r) + (N^z_6 + M^z_{61} + L^z_6),$$
$$c_{25} = -(p + q_1 + q_2) + (N^z_6 + M^z_{61} + M^z_{62}), \quad \bar{c}_{26} = -(2q_1 + r),$$
$$c_{31} = -2q_2 + 2(N^z_6 + M^z_{62} + L^z_6), \quad \bar{c}_{32} = -2(p + q_1 + r) + 2M^z_{61},$$
$$c_{33} = -2l + 2R^z_6, \quad \bar{c}_{34} = -2r + rP^z_6,$$
$$c_{35} = -2m_1 + 2Q^z_{61}, \quad \bar{c}_{36} = -2m_1,$$
$$\bar{c}_{41} = -2q_2 + 2(N^z_6 + M^z_{61} + L^z_6), \quad \bar{c}_{42} = -2(p + q_2 + r) + 2M^z_{62},$$
$$\bar{c}_{43} = -2n + 2p^z_6, \quad \bar{c}_{44} = -2l + 2R^z_6,$$
$$\bar{c}_{45} = -2m_2 + 2Q^z_{62}, \quad \bar{c}_{46} = -2m_2,$$
$$\bar{c}_{51} = -2r + 2(M^z_{61} + M^z_{62} + L^z_6), \quad \bar{c}_{52} = -2(p + q_1 + q_2) + 2N^z_6,$$
$$\bar{c}_{53} = -2m_1 + 2Q^z_{61}, \quad \bar{c}_{54} = -2m_2 + 2Q^z_{62},$$
$$\bar{c}_{55} = -2l + 2R^z_6, \bar{c}_{56} = -2n,$$
$$\bar{c}_{61} = -4p + 4M^z_{61} + 4M^z_{62} + 4N^z_6, \quad \bar{c}_{62} = -4(q_1 + q_2 + r) + 4L^z_6,$$
$$\bar{c}_{63} = -4m_1 + 4Q^z_{61}, \quad \bar{c}_{64} = -4m_2 + 4Q^z_{62},$$
$$\bar{c}_{65} = -4n + 4P^z_6, \quad \bar{c}_{66} = -2l,$$
$$\bar{c}_1 = L^z_6, \quad \bar{c}_2 = N^z_6 + M^z_{61} + M^z_{62}, \quad \bar{c}_3 = 2Q^z_{62},$$
$$\bar{c}_4 = 2Q^z_{61}, \quad \bar{c}_5 = 2P^z_6, \quad \bar{c}_6 = 4R^z_6,$$

де

$$p = \frac{1}{4}(K_1 - K_2 + K_3 - K_4 + K_5 - K_6 + K_7 - K_8),$$

$$
\begin{aligned}
q_1 &= \frac{1}{4}(K_1-K_2-K_3+K_4+K_5+K_6-K_7-K_8),\\
q_2 &= \frac{1}{4}(K_1-K_2-K_3+K_4-K_5-K_6+K_7+K_8),\\
r &= \frac{1}{4}(K_1-K_2+K_3-K_4-K_5+K_6-K_7+K_8),\\
n &= \frac{1}{4}(K_1+K_2+K_3+K_4-K_5-K_6-K_7-K_8),\\
m_1 &= \frac{1}{4}(K_1+K_2-K_3-K_4+K_5-K_6-K_7+K_8),\\
m_2 &= \frac{1}{4}(K_1+K_2-K_3-K_4-K_5+K_6+K_7-K_8),\\
l &= \frac{1}{4}(K_1+K_2+K_3+K_4+K_5+K_6+K_7+K_8),\\
P_6^z &= \frac{1}{4}(K_1Z_1-K_2Z_2+K_3Z_3-K_4Z_4+K_5Z_5-K_6Z_6+K_7Z_7-K_8Z_8),\\
Q_{61}^z &= \frac{1}{4}(K_1Z_1-K_2Z_2-K_3Z_3+K_4Z_4+K_5Z_5+K_6Z_6-K_7Z_7-K_8Z_8),\\
Q_{62}^z &= \frac{1}{4}(K_1Z_1-K_2Z_2-K_3Z_3+K_4Z_4-K_5Z_5-K_6Z_6+K_7Z_7+K_8Z_8),\\
R_6^z &= \frac{1}{4}(K_1Z_1-K_2Z_2+K_3Z_3-K_4Z_4-K_5Z_5+K_6Z_6-K_7Z_7+K_8Z_8),\\
N_6^z &= \frac{1}{4}(K_1Z_1+K_2Z_2+K_3Z_3+K_4Z_4-K_5Z_5-K_6Z_6-K_7Z_7-K_8Z_8),\\
M_{61}^z &= \frac{1}{4}(K_1Z_1+K_2Z_2-K_3Z_3-K_4Z_4+K_5Z_5-K_6Z_6-K_7Z_7+K_8Z_8),\\
M_{62}^z &= \frac{1}{4}(K_1Z_1+K_2Z_2-K_3Z_3-K_4Z_4-K_5Z_5+K_6Z_6+K_7Z_7-K_8Z_8),\\
L_6^z &= \frac{1}{4}(K_1Z_1+K_2Z_2+K_3Z_3+K_4Z_4+K_5Z_5+K_6Z_6+K_7Z_7+K_8Z_8).
\end{aligned}
$$

В одночастинковому наближенні з (2.1) отримуємо

$$\frac{d}{dt}\eta^{(1)z} = -2\bar{k}\eta^{(1)z} + 2\bar{K}\,\mathrm{th}\frac{\bar{z}_6}{2}, \tag{2.18}$$

де $\bar{K} = \int\limits_0^\infty dte^{-\varepsilon t}\cos\bar{\Omega}^z + \mathrm{Re}\big[\langle\bar{u}^-(t)\bar{u}^+\rangle_q + \langle\bar{u}^+(t)\bar{u}^-\rangle_q\big]$, а $\bar{\Omega}^z = -\bar{z}_6^z/\beta$.

Відзначимо, що у випадку $K_\mu = K = 1/2\alpha$ отримана в цьому розділі система кінетичних рівнянь (2.17) узгоджується із системою рівнянь (5.7), отриманою в роботі [38] в рамках стохастичної моделі Глаубера. Рівняння Глаубера описують фактично таку фізичну ситуацію, в якій фур'є-образи кореляторів термостата не залежать від

частоти [30–32].

3. Системи рівнянь для залежних від часу функцій розподілу дейтронів кристалу KD_2PO_4 при прикладанні зовнішнього поля E_1

Кінетичне рівняння, яке визначає динаміку псевдоспінових операторів, має наступний вигляд [30–32]:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{p}_m\rangle = -\sum_{qf}\sum_{\mu\alpha}\left\{K^\alpha_{f\mu}Q^-_{qf\mu\alpha}(\hat{p}_m) + \mathrm{th}\frac{\beta\Omega^x_{f\mu}}{2}Q^+_{qf\mu\alpha}(\hat{p}_m)K^\alpha_{f\mu},\right\} \tag{3.1}$$

де використані такі позначення:

$$Q^\mp_{qf\mu\alpha}(\hat{p}_m) = \langle\Big[\big[\hat{p}_m, S^{-\alpha}_{qf}(\Omega^\alpha_{f\mu})\big], S^\alpha_{qf}(\Omega^\alpha_{f\mu})\Big]^\mp\rangle_q, \tag{3.2}$$

$$K^\alpha_{f\mu} = \int_0^\infty dte^{-\varepsilon t}\cos(\Omega^x_{f\mu}t)\mathrm{Re}\big[\langle\bar{u}^{-\alpha}(t)\bar{u}^\alpha\rangle_q\big], \tag{3.3}$$

а $\bar{u}^{-\alpha}(t)$, $\bar{u}^\alpha$ – оператори, що залежать від змінних гратки-термостата, $\Omega^x_{f\mu}$ – власні значення чотиричастинкового гамільтоніана [39]

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_q^{(4)} = {}& (-\delta_{s6}\varepsilon_6 - 2\delta_{16}\varepsilon_6)\left(\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2} + \frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} +\right.\\
&\left. + \frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} + \frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2}\right) +\\
& + 2(\delta_{a4}\varepsilon_4 - \delta_{14}\varepsilon_4)\left(\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} - \frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2}\right) +\\
& + 2(\delta_{a5}\varepsilon_5 - \delta_{15}\varepsilon_5)\left(\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} - \frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}\right) +\\
& + (V + \delta_{a6}\varepsilon_6)\left(\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q2}}{2} + \frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2}\right) +\\
& + (V - \delta_{a6}\varepsilon_6)\left(\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2} + \frac{\sigma_{q4}}{2}\frac{\sigma_{q1}}{2}\right) +\\
& + U\left(\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2} + \frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2}\right) + \Phi\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} -\\
& - \frac{1}{4}(\delta_{s6}\varepsilon_6 - 2\delta_{16}\varepsilon_6)\sum_{f=1}^4\frac{\sigma_{qf}}{2} +\\
& - \frac{1}{2}(\delta_{a4}\varepsilon_4 + \delta_{14}\varepsilon_4)\left(\frac{\sigma_{q1}}{2} - \frac{\sigma_{q3}}{2}\right) - \frac{1}{2}(\delta_{a5}\varepsilon_5 + \delta_{15}\varepsilon_5)\left(-\frac{\sigma_{q2}}{2} + \frac{\sigma_{q4}}{2}\right) -
\end{aligned} \tag{3.4}
$$

$$-\sum_{f=1}^{4}\frac{x_{fj}}{\beta}\frac{\sigma_{qf}}{2},$$

і одночастинкових гамільтоніанів

$$\hat{H}^{(1)}_{qf}(4) = \frac{\bar{x}_{f4}}{\beta}\frac{\sigma_{qf}}{2}. \tag{3.5}$$

У (3.4) і (3.5) використані наступні позначення:

$$\begin{aligned}
x_{\substack{1\\3}4} &= \beta\big[-\Delta^a + 2\nu_{\substack{1\\3}}\eta_1^{(1)}(4) + 2\nu_{\substack{3\\1}}\eta_3^{(1)}(4) + 2\nu_2\eta_2^{(1)}(4) + 2\nu_2\eta_4^{(1)}(4) - \\
&\quad -2\psi_6\varepsilon_6 \pm 2\psi_4\varepsilon_4 \pm \mu_1\cos\gamma E_1\big],\\
x_{\substack{2\\4}4} &= \beta\big[-\Delta^a + 2\nu_2\eta_1^{(1)}(4) + 2\nu_2\eta_3^{(1)}(4) + 2\nu_{\substack{1\\3}}\eta_2^{(1)}(4) + 2\nu_{\substack{3\\1}}\eta_4^{(1)}(4) - \\
&\quad -2\psi_6\varepsilon_6 \pm \mu_1\sin\gamma E_1\big],\\
\bar{x}_{f4} &= -\beta\Delta^a + x_{f4}.
\end{aligned}$$

Визначимо закон еволюції псевдоспінових операторів $\sigma^\alpha_{qf}(t)$:

$$\begin{aligned}
\sigma^\alpha_{qf}(t) &= \exp\big[i\hat{H}^{(4)}_{q4}t\big]\sigma^\alpha_{qf}\exp\big[-i\hat{H}^{(4)}_{q4}t\big] = \\
&= \sigma^\alpha_{qf} + it\left[\big[\hat{H}^{(4)}_{q4}, \sigma^\alpha_{qf}\big] + \frac{1}{2!}(it)^2\big[\hat{H}^{(4)}_{q4}, \big[\hat{H}^{(4)}_{q4}, \sigma^\alpha_{qf}\big]\right] + \ldots
\end{aligned} \tag{3.6}$$

Розраховуючи комутатори, що входять у (3.6), закон еволюції псевдоспінових операторів можна записати у такому вигляді:

$$\sigma^\alpha_{qf}(t) = \sigma^\alpha_{qf}\exp\big(-i\alpha t\bar{\Omega}^x_f\big), \tag{3.7}$$

де

$$\begin{aligned}
\bar{\Omega}^x_1 &= -\Bigg[(V+\delta_{a6}\varepsilon_6)\frac{\sigma_{q2}}{2} + (V-\delta_{a6}\varepsilon_6)\frac{\sigma_{q4}}{2} + U\frac{\sigma_{q3}}{2} + \Phi\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} - \\
&-\varepsilon_6(\delta_{s6}+2\delta_{16})\left(\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2} + \frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} + \frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2}\right) + \varepsilon_6\left(-\frac{\delta_{s6}}{4} + \frac{\delta_{16}}{2}\right) + \\
&+\varepsilon_4(2\delta_{a4}-2\delta_{14})\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} + \varepsilon_4\left(\frac{\delta_{a4}}{2} + \frac{\delta_{14}}{2}\right) - \frac{x_{14}}{\beta}\Bigg],\\
\bar{\Omega}^x_2 &= -\Bigg[(V+\delta_{a6}\varepsilon_6)\frac{\sigma_{q1}}{2} + (V-\delta_{a6}\varepsilon_6)\frac{\sigma_{q3}}{2} + U\frac{\sigma_{q4}}{2} + \Phi\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} - \\
&-\varepsilon_6(\delta_{s6}+2\delta_{16})\left(\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2} + \frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} + \frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2}\right) + \varepsilon_6\left(-\frac{\delta_{s6}}{4} + \frac{\delta_{16}}{2}\right) + \\
&+\varepsilon_4(2\delta_{a4}-2\delta_{14})\left(\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} - \frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2}\right) - \frac{x_{24}}{\beta}\Bigg],
\end{aligned} \tag{3.8}$$

$$\begin{aligned}
\bar{\Omega}^x_3 &= -\Bigg[(V+\delta_{a6}\varepsilon_6)\frac{\sigma_{q4}}{2} + (V-\delta_{a6}\varepsilon_6)\frac{\sigma_{q2}}{2} + U\frac{\sigma_{q1}}{2} + \Phi\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} - \\
&-\varepsilon_6(\delta_{s6}+2\delta_{16})\left(\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q2}}{2} + \frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} + \frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2}\right) + \varepsilon_6\left(-\frac{\delta_{s6}}{4} + \frac{\delta_{16}}{2}\right) - \\
&-\varepsilon_4(2\delta_{a4}-2\delta_{14})\left(\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2}\right) + \varepsilon_4\left(\frac{\delta_{a4}}{2} + \frac{\delta_{14}}{2}\right) - \frac{x_{34}}{\beta}\Bigg],\\
\bar{\Omega}^x_4 &= -\Bigg[(V+\delta_{a6}\varepsilon_6)\frac{\sigma_{q3}}{2} + (V-\delta_{a6}\varepsilon_6)\frac{\sigma_{q1}}{2} + U\frac{\sigma_{q2}}{2} + \Phi\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2} - \\
&-\varepsilon_6(\delta_{s6}+2\delta_{16})\left(\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q2}}{2} + \frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2} + \frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}\right) + \varepsilon_6\left(-\frac{\delta_{s6}}{4} + \frac{\delta_{16}}{2}\right) + \\
&+\varepsilon_4(2\delta_{a4}-2\delta_{14})\left(\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q2}}{2} - \frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}\right) - \frac{x_{44}}{\beta}\Bigg].
\end{aligned}$$

Аналогічно отримуємо закон еволюції псевдоспінових операторів в одночастинковому наближенні:

$$\sigma^\alpha_{qf}(t) = \sigma^\alpha_{qf}\exp\big(-i\alpha t\bar{\Omega}^z_f\big),$$

де $\bar{\Omega}^z_f = -\bar{x}_f/\beta$.

Враховуючи, що псевдоспінові оператори σ_{qf} набувають значень ± 1, то власні значення гамільтоніана (3.4) набувають вигляду:

$$\begin{aligned}
\Omega^x_{1\substack{1\\2}} &= \pm w + (\delta_{s6}+\delta_{16})\varepsilon_6 + \delta_{14}\varepsilon_4 + \frac{x_{14}}{\beta},\\
\Omega^x_{1\substack{3\\2}} &= \pm w + (\delta_{s6}+\delta_{16})\varepsilon_6 - \delta_{14}\varepsilon_4 + \frac{x_{34}}{\beta},\\
\Omega^x_{1\substack{3\\4}} &= \pm(w-w_1) - \delta_{16})\varepsilon_6 + \delta_{14}\varepsilon_4 + \frac{x_{14}}{\beta},\\
\Omega^x_{3\substack{3\\4}} &= \pm(w-w_1) - \delta_{16})\varepsilon_6 - \delta_{14}\varepsilon_4 + \frac{x_{34}}{\beta},\\
\Omega^x_{1\substack{5\\6}} &= \pm(\varepsilon-w) - (\delta_{a6}+\delta_{16})\varepsilon_6 + \delta_{a4}\varepsilon_4 + \frac{x_{14}}{\beta},\\
\Omega^x_{3\substack{5\\6}} &= \pm(\varepsilon-w) - (\delta_{a6}+\delta_{16})\varepsilon_6 - \delta_{a4}\varepsilon_4 + \frac{x_{24}}{\beta},\\
\Omega^x_{1\substack{7\\8}} &= \pm(\varepsilon-w) + (\delta_{a6}-\delta_{16})\varepsilon_6 + \delta_{a4}\varepsilon_4 + \frac{x_{14}}{\beta},\\
\Omega^x_{3\substack{7\\8}} &= \pm(\varepsilon-w) + (\delta_{a6}-\delta_{16})\varepsilon_6 - \delta_{a4}\varepsilon_4 + \frac{x_{34}}{\beta},\\
\Omega^x_{2\substack{1\\2}} &= \pm w + (\delta_{s6}+\delta_{16})\varepsilon_6 + \frac{x_{24}}{\beta},\\
\Omega^x_{4\substack{1\\2}} &= \pm w + (\delta_{s6}+\delta_{16})\varepsilon_6 + \frac{x_{44}}{\beta},
\end{aligned} \tag{3.9}$$

$$\Omega^x_{2{\substack{3\\4}}} = \pm(w - w_1) - \delta_{16})\varepsilon_6 + \frac{x_{24}}{\beta},$$
$$\Omega^x_{4{\substack{3\\4}}} = \pm(w - w_1) - \delta_{16})\varepsilon_6 + \frac{x_{44}}{\beta},$$
$$\Omega^x_{2{\substack{5\\6}}} = \pm(\varepsilon - w) - (\delta_{a6} + \delta_{16})\varepsilon_6 \mp (\delta_{a4} - \delta_{14})\varepsilon_4 + \frac{x_{24}}{\beta},$$
$$\Omega^x_{4{\substack{5\\6}}} = \pm(\varepsilon - w) - (\delta_{a6} + \delta_{16})\varepsilon_6 \pm (\delta_{a4} - \delta_{14})\varepsilon_4 + \frac{x_{44}}{\beta},$$
$$\Omega^x_{2{\substack{7\\8}}} = \pm(\varepsilon - w) + (\delta_{a6} - \delta_{16})\varepsilon_6 \pm (\delta_{a4} - \delta_{14})\varepsilon_4 + \frac{x_{14}}{\beta},$$
$$\Omega^x_{4{\substack{7\\8}}} = \pm(\varepsilon - w) + (\delta_{a6} - \delta_{16})\varepsilon_6 \mp (\delta_{a4} - \delta_{14})\varepsilon_4 + \frac{x_{44}}{\beta}.$$

Перейдемо в (3.7) до частотного представлення:

$$\sigma^\alpha_{qf}(t) = \sigma^\alpha_{qf} e^{-it\alpha\bar{\Omega}^z_f} = \sum_{\mu=1}^{8} \sigma^\alpha_{qf}\big(\Omega^x_{f\mu}\big) e^{-it\alpha\Omega^x_{f\mu}} =$$
$$= \sigma^\alpha_{qf} \sum_{\mu=1}^{8} R_{qf}\big(\Omega^x_{f\mu}\big) e^{-it\alpha\Omega^x_{f\mu}}, \tag{3.10}$$

а $R_{qf}\big(\Omega^x_{f\mu}\big)$ збігається з $R_{qf}\big(\Omega^z_{\mu}\big)$ (2.11).

Здійснивши розрахунок виразів $Q^{\mp}_{qf\mu\alpha}(\hat{P}_m)$, отримуємо кінетичне рівняння (3.1) у такому вигляді:

$$\frac{d}{dt}\langle \prod_{f\{1\ldots4\}} \sigma_{qf}\rangle = -2\sum_{\mu=1}^{8}\Bigg[\langle \prod_{f\{1\ldots4\}} \sigma_{qf} \sum_{f\{1\ldots4\}} K_{f\mu} R_{qf}\big(\Omega^x_{f\mu}\big)\rangle -$$
$$-\langle \prod_{f\{1\ldots4\}} \sigma_{qf} \sum_{f\{1\ldots4\}} K_{f\mu} Z_{f\mu} \sigma_{qf} R_{qf}\big(\Omega^x_{f\mu}\big)\rangle\Bigg], \tag{3.11}$$

де

$$Z_{f\mu} = \mathrm{th}\frac{\beta}{2}\Omega^x_{f\mu}, \tag{3.12}$$

$$K_{f\mu} = \int\limits_0^\infty dt e^{-\varepsilon t}\cos\big(\Omega^x_{f\mu}t\big) Re\big[\langle \bar{u}^-(t)\bar{u}^+\rangle_q + \langle \bar{u}^+(t)\bar{u}^-\rangle_q\big]. \tag{3.13}$$

Як приклади, запишемо кінетичні рівняння для унарної, парної і тетрарної функції:

$$\frac{d}{dt}\langle\sigma_{q1}\rangle = -2\sum_{\mu=1}^{8}\big[\langle K_{1\mu}\sigma_{q1} R_{q1}\big(\Omega^x_{1\mu}\big) - K_{1\mu} Z_{1\mu}\langle R_{q1}\big(\Omega^x_{1\mu}\big)\rangle\big],$$

$$\frac{d}{dt}\langle\sigma_{q2}\sigma_{q3}\rangle = -2\sum_{\mu=1}^{8}\big\{\langle\sigma_{q2}\sigma_{q3}\big[K_{2\mu}R_{q2}\big(\Omega^x_{2\mu}\big) + K_{3\mu}R_{q3}\big(\Omega^x_{3\mu}\big)\big] -$$
$$-\langle K_{2\mu}Z_{2\mu}\sigma_{q2}R_{q3}\big(\Omega^x_{3\mu}\big) + K_{3\mu}Z_{3\mu}\sigma_{q3}R_{q2}\big(\Omega^x_{2\mu}\big)\rangle\big\},$$
$$\frac{d}{dt}\langle\sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q3}\rangle =$$
$$= -2\sum_{\mu=1}^{8}\big\{\sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q3}\big[K_{1\mu}R_{q1}\big(\Omega^x_{1\mu}\big) + K_{2\mu}R_{q2}\big(\Omega^x_{2\mu}\big) + K_{3\mu}R_{q3}\big(\Omega^x_{3\mu}\big)\big] -$$
$$-\langle K_{1\mu}Z_{1\mu}\sigma_{q1}\sigma_{q2}R_{q3}\big(\Omega^x_{3\mu}\big) + K_{2\mu}Z_{2\mu}\sigma_{q1}\sigma_{q3}R_{q2}\big(\Omega^x_{2\mu}\big) +$$
$$+K_{3\mu}Z_{3\mu}\sigma_{q2}\sigma_{q3}R_{1\mu}\big(\Omega^x_{1\mu}\big)\rangle\big\}.$$

При прикладанні до кристалу електричного поля E_1 функції розподілу дейтронів мають наступну симетрію:

$$\eta^{(1)x}_f = \langle\sigma_{qf}\rangle,\ \eta^{(3)x}_{\substack{1\\3}} = \langle\sigma_{q{\substack{2\\1}}}\sigma_{q{\substack{3\\2}}}\sigma_{\substack{4\\4}}\rangle,\ \eta^{(3)x}_{\substack{2\\4}} = \langle\sigma_{q{\substack{1\\1}}}\sigma_{q{\substack{3\\2}}}\sigma_{\substack{4\\3}}\rangle,$$
$$\eta^{(2)x}_{\substack{14\\23}} = \langle\sigma_{q{\substack{1\\2}}}\sigma_{q{\substack{4\\3}}}\rangle,\ \eta^{(2)x}_{\substack{12\\34}} = \langle\sigma_{q{\substack{1\\3}}}\sigma_{q{\substack{2\\4}}}\rangle,\ \eta^{(2)x}_{\substack{13\\24}} = \langle\sigma_{q{\substack{1\\2}}}\sigma_{q{\substack{3\\4}}}\rangle,$$
$$\eta^{(4)x} = \langle\sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q3}\sigma_{q4}\rangle. \tag{3.14}$$

Враховуючи симетрію функцій розподілу (3.14) на основі рівняння (3.11) отримуємо систему рівнянь для часозалежних функцій розподілу псевдоспінової підсистеми KD_2PO_4 у наступному вигляді:

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}\eta^{(1)x}_1\\ \eta^{(1)x}_3\\ \eta^{(1)x}_2\\ \eta^{(1)x}_4\\ \eta^{(3)x}_1\\ \eta^{(3)x}_3\\ \eta^{(3)x}_2\\ \eta^{(3)x}_4\\ \eta^{(2)x}_{14}\\ \eta^{(2)x}_{23}\\ \eta^{(2)x}_{12}\\ \eta^{(2)x}_{34}\\ \eta^{(2)x}_{13}\\ \eta^{(2)x}_{24}\\ \eta^{(4)x}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\bar{a}_{11} & \bar{a}_{12} & \ldots & \bar{a}_{115}\\ \bar{a}_{21} & \bar{a}_{22} & \ldots & \bar{a}_{215}\\ \bar{a}_{31} & \bar{a}_{32} & \ldots & \bar{a}_{315}\\ \bar{a}_{41} & \bar{a}_{42} & \ldots & \bar{a}_{415}\\ \bar{a}_{51} & \bar{a}_{52} & \ldots & \bar{a}_{515}\\ \bar{a}_{61} & \bar{a}_{62} & \ldots & \bar{a}_{615}\\ \bar{a}_{71} & \bar{a}_{72} & \ldots & \bar{a}_{715}\\ \bar{a}_{81} & \bar{a}_{82} & \ldots & \bar{a}_{815}\\ \bar{a}_{91} & \bar{a}_{92} & \ldots & \bar{a}_{915}\\ \bar{a}_{101} & \bar{a}_{102} & \ldots & \bar{a}_{1015}\\ \bar{a}_{111} & \bar{a}_{112} & \ldots & \bar{a}_{1115}\\ \bar{a}_{121} & \bar{a}_{122} & \ldots & \bar{a}_{1215}\\ \bar{a}_{131} & \bar{a}_{132} & \ldots & \bar{a}_{1315}\\ \bar{a}_{141} & \bar{a}_{142} & \ldots & \bar{a}_{1415}\\ \bar{a}_{151} & \bar{a}_{152} & \ldots & \bar{a}_{1515}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\eta^{(1)x}_1\\ \eta^{(1)x}_3\\ \eta^{(1)x}_2\\ \eta^{(1)x}_4\\ \eta^{(3)x}_1\\ \eta^{(3)x}_3\\ \eta^{(3)x}_2\\ \eta^{(3)x}_4\\ \eta^{(2)x}_{14}\\ \eta^{(2)x}_{23}\\ \eta^{(2)x}_{12}\\ \eta^{(2)x}_{34}\\ \eta^{(2)x}_{13}\\ \eta^{(2)x}_{24}\\ \eta^{(4)x}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\bar{a}_1\\ \bar{a}_2\\ \bar{a}_3\\ \bar{a}_4\\ \bar{a}_5\\ \bar{a}_6\\ \bar{a}_7\\ \bar{a}_8\\ \bar{a}_9\\ \bar{a}_{10}\\ \bar{a}_{11}\\ \bar{a}_{12}\\ \bar{a}_{13}\\ \bar{a}_{14}\\ \bar{a}_{15}\end{pmatrix}, \tag{3.15}$$

а коефіцієнти системи (3.15) мають такий вигляд:

$$\bar a_{11} = -l_1, \quad \bar a_{12} = P^x_{41}, \quad \bar a_{13} = Q^x_{411}, \quad \bar a_{14} = Q^x_{412},$$
$$\bar a_{15} = R^x_{41}, \quad \bar a_{16} = -n_1, \quad \bar a_{17} = -m_{11}, \quad \bar a_{18} = -m_{12},$$
$$\bar a_{19} = -q_{12}, \quad \bar a_{110} = M^x_{411}, \quad \bar a_{111} = -q_{11}, \quad \bar a_{112} = M^x_{412},$$
$$\bar a_{113} = -r_1, \quad \bar a_{114} = N^x_{41}, \quad \bar a_{115} = -p_1, \quad \bar a_1 = L^x_{41},$$
$$\bar a_{21} = P^x_{43}, \quad \bar a_{22} = -l_2, \quad \bar a_{23} = Q^x_{432}, \quad \bar a_{24} = Q^x_{431},$$
$$\bar a_{25} = -n_3, \quad \bar a_{26} = R^x_{43}, \quad \bar a_{27} = -m_{31}, \quad \bar a_{28} = -m_{32},$$
$$\bar a_{29} = M^x_{431}, \quad \bar a_{210} = -q_{31}, \quad \bar a_{211} = M^x_{432}, \quad \bar a_{212} = -q_{32},$$
$$\bar a_{213} = -r_3, \quad \bar a_{214} = N^x_{41}, \quad \bar a_{215} = -p_3, \quad \bar a_2 = L^x_{43},$$
$$\bar a_{31} = Q^x_{421}, \quad \bar a_{32} = Q^x_{422}, \quad \bar a_{33} = -l_2, \quad \bar a_{34} = P^x_{42},$$
$$\bar a_{35} = -m_{22}, \quad \bar a_{36} = -m_{21}, \quad \bar a_{37} = R^x_{42}, \quad \bar a_{38} = -n_2,$$
$$\bar a_{39} = M^x_{421}, \quad \bar a_{310} = -q_{21}, \quad \bar a_{311} = -q_{22}, \quad \bar a_{312} = M^x_{422},$$
$$\bar a_{313} = N^x_{42}, \quad \bar a_{314} = -r_2, \quad \bar a_{315} = -p_2, \quad \bar a_3 = L^x_{42},$$
$$\bar a_{41} = Q^x_{442}, \quad \bar a_{42} = Q^x_{441}, \quad \bar a_{43} = P^x_{44}, \quad \bar a_{44} = -l_4,$$
$$\bar a_{45} = -m_{41}, \quad \bar a_{46} = -m_{42}, \quad \bar a_{47} = -n_4, \quad \bar a_{48} = R^x_{44},$$
$$\bar a_{49} = -q_{41}, \quad \bar a_{410} = M^x_{441}, \quad \bar a_{411} = M^x_{442}, \quad \bar a_{412} = -q_{42},$$
$$\bar a_{413} = N^x_{44}, \quad \bar a_{414} = -r_4, \quad \bar a_{415} = -p_4, \quad \bar a_4 = L^x_{44},$$
$$\bar a_{51} = R^x_{42} + R^x_{43} + R^x_{44}, \quad \bar a_{52} = -n_3 + P^x_{42} + P^x_{44},$$
$$\bar a_{53} = -m_{22} + Q^x_{431} + Q^x_{441}, \quad \bar a_{54} = -m_{42} + Q^x_{422} + Q^x_{432},$$
$$\bar a_{55} = -(l_2 + l_3 + l_4), \quad \bar a_{56} = -(n_2 + n_4) + P^x_{43},$$
$$\bar a_{57} = -(m_{32} + m_{42}) + Q^x_{421}, \quad \bar a_{58} = -(m_{22} + m_{32}) + Q^x_{442},$$
$$\bar a_{59} = -p_4 + N^x_{42} + M^x_{432}, \quad \bar a_{510} = -(q_{32} + r_2) + L^x_{44},$$
$$\bar a_{511} = -p_2 + M^x_{431} + N^x_{44}, \quad \bar a_{512} = -(q_{31} + r_4) + L^x_{42},$$
$$\bar a_{513} = -p_3 + M^x_{421} + M^x_{442}, \quad \bar a_{514} = -(q_{21} + q_{42}) + L^x_{43},$$
$$\bar a_{515} = -(q_{22} + q_{41} + r_3), \quad \bar a_5 = M^x_{422} + M^x_{441} + N^x_{43},$$
$$\bar a_{61} = -n_1 + P^x_{42} + P^x_{44}, \quad \bar a_{62} = R^x_{41} + R^x_{42} + R^x_{44},$$
$$\bar a_{63} = -m_{21} + Q^x_{412} + Q^x_{442}, \quad \bar a_{64} = -m_{41} + Q^x_{411} + Q^x_{421},$$
$$\bar a_{65} = -(n_2 + n_4) + P^x_{41}, \quad \bar a_{66} = -(l_1 + l_2 + l_4),$$
$$\bar a_{67} = -(m_{12} + m_{41}) + Q^x_{422}, \quad \bar a_{68} = -(m_{11} + m_{22}) + Q^x_{441},$$
$$\bar a_{69} = -(q_{11} + r_4) + L^x_{42}, \quad \bar a_{610} = -p_2 + M^x_{412} + N^x_{441},$$
$$\bar a_{611} = -(q_{12} + r_2) + L^x_{44}, \quad \bar a_{612} = -p_4 + M^x_{411} + N^x_{42},$$
$$\bar a_{613} = -p_1 + M^x_{422} + M^x_{441}, \quad \bar a_{614} = -(q_{22} + q_{41}) + L^x_{41},$$
$$\bar a_{615} = -(q_{21} + q_{42} + r_1), \quad \bar a_6 = M^x_{421} + M^x_{442} + N^x_{41},$$

$$\bar a_{71} = -m_{11} + Q^x_{431} + Q^x_{441}, \quad \bar a_{72} = -m_{31} + Q^x_{412} + Q^x_{442},$$
$$\bar a_{73} = R^x_{41} + R^x_{43} + R^x_{44}, \quad \bar a_{74} = -n_4 + P^x_{41} + P^x_{43},$$
$$\bar a_{75} = -(m_{32} + m_{42}) + Q^x_{411}, \quad \bar a_{76} = -(m_{12} + m_{41}) + Q^x_{432},$$
$$\bar a_{77} = -(l_1 + l_3 + l_4), \quad \bar a_{78} = -(n_1 + n_3) + P^x_{44},$$
$$\bar a_{79} = -(q_{42} + r_1) + L^x_{43}, \quad \bar a_{710} = -p_3 + M^x_{442} + N^x_{41},$$
$$\bar a_{711} = -p_1 + M^x_{441} + N^x_{43}, \quad \bar a_{712} = -(q_{41} + r_3) + L^x_{41},$$
$$\bar a_{713} = -(q_{12} + q_{33}) + L^x_{44}, \quad \bar a_{714} = -p_4 + M^x_{411} + M^x_{432},$$
$$\bar a_{715} = -(q_{11} + q_{31} + r_4), \quad \bar a_7 = M^x_{412} + M^x_{431} + N^x_{44},$$
$$\bar a_{81} = -m_{12} + Q^x_{422} + Q^x_{432}, \quad \bar a_{82} = -m_{32} + Q^x_{411} + Q^x_{421},$$
$$\bar a_{83} = -n_2 + P^x_{41} + P^x_{42}, \quad \bar a_{84} = R_{41} + R^x_{43} + R^x_{43},$$
$$\bar a_{85} = -(m_{21} + m_{31}) + Q^x_{412}, \quad \bar a_{86} = -(m_{11} + m_{22}) + Q^x_{431},$$
$$\bar a_{87} = -(n_1 + n_3) + P^x_{42}, \quad \bar a_{88} = -(l_1 + l_2 + l_3),$$
$$\bar a_{89} = -p_1 + M^x_{412} + N^x_{43}, \quad \bar a_{810} = -(q_{22} + r_3) + L^x_{41},$$
$$\bar a_{811} = -(q_{21} + r_1) + L^x_{43}, \quad \bar a_{812} = -p_3 + M^x_{421} + N^x_{41},$$
$$\bar a_{813} = -(q_{11} + q_{31}) + L^x_{42}, \quad \bar a_{814} = -p_2 + M^x_{412} + M^x_{431},$$
$$\bar a_{815} = -(q_{12} + q_{32} + r_2), \quad \bar a_8 = M^x_{411} + M^x_{432} + N^x_{42},$$
$$\bar a_{91} = -q_{12} + L^x_{44}, \quad \bar a_{92} = M^x_{412} + N^x_{44},$$
$$\bar a_{93} = M^x_{442} + N^x_{41}, \quad \bar a_{94} = -q_{41} + L^x_{41},$$
$$\bar a_{95} = -p_4 + M^x_{411}, \quad \bar a_{96} = -(q_{11} + r_4),$$
$$\bar a_{97} = -(q_{42} + r_1), \quad \bar a_{98} = -p_1 + M^x_{441},$$
$$\bar a_{99} = -(l_1 + l_4), \quad \bar a_{910} = R^x_{41} + R^x_{44},$$
$$\bar a_{911} = -n_1 + P^x_{44}, \quad \bar a_{912} = -n_4 + P^x_{41},$$
$$\bar a_{913} = -m_{11} + Q^x_{441}, \quad \bar a_{914} = -m_{12} + Q^x_{411},$$
$$\bar a_{915} = -(m_{12} + m_{41}), \quad \bar a_9 = Q^x_{412} + Q^x_{442},$$
$$\bar a_{101} = M^x_{432} + N^x_{42}, \quad \bar a_{102} = -q_{21} + L^x_{42},$$
$$\bar a_{103} = -q_{31} + L^x_{43}, \quad \bar a_{104} = M^x_{422} + N^x_{43},$$
$$\bar a_{105} = -(q_{32} + r_2), \quad \bar a_{106} = -p_2 + M^x_{431},$$
$$\bar a_{107} = -p_3 + M^x_{421}, \quad \bar a_{108} = -(q_{22} + r_3),$$
$$\bar a_{109} = R^x_{42} + R^x_{43}, \quad \bar a_{1010} = -(l_2 + l_3),$$
$$\bar a_{1011} = -n_2 + P^x_{43}, \quad \bar a_{1012} = -n_3 + P^x_{42},$$
$$\bar a_{1013} = -m_{32} + Q^x_{421}, \quad \bar a_{1014} = -m_{22} + Q^x_{431},$$
$$\bar a_{1015} = -(m_{21} + m_{31}), \quad \bar a_{10} = Q^x_{422} + Q^x_{432},$$
$$\bar a_{111} = -q_{11} + L^x_{42}, \quad \bar a_{112} = -q_{22} + M^x_{411} + N^x_{42},$$

$$\bar{a}_{113} = L^x_{41}, \quad \bar{a}_{114} = M^x_{421} + N^x_{41},$$
$$\bar{a}_{115} = -p_2 + M^x_{412}, \quad \bar{a}_{116} = -(q_{22} + r_2),$$
$$\bar{a}_{117} = -p_1 + M^x_{422}, \quad \bar{a}_{118} = -(q_{22} + r_1),$$
$$\bar{a}_{119} = -n_1 + P^x_{42}, \quad \bar{a}_{1110} = -n_2 + P^x_{41},$$
$$\bar{a}_{1111} = -(l_1 + l_2), \quad \bar{a}_{1112} = R^x_{41} + R^x_{42},$$
$$\bar{a}_{1113} = -m_{12} + Q^x_{422}, \quad \bar{a}_{1114} = -m_{21} + Q^x_{412},$$
$$\bar{a}_{1115} = -(m_{11} + m_{22}), \quad \bar{a}_{11} = Q^x_{411} + Q^x_{421},$$
$$\bar{a}_{121} = M^x_{431} + N^x_{44}, \quad \bar{a}_{122} = L^x_{44},$$
$$\bar{a}_{123} = -q_{32} + M^x_{441} + N^x_{43}, \quad \bar{a}_{124} = -q_{42} + L^x_{43},$$
$$\bar{a}_{125} = -(q_{31} + r_4), \quad \bar{a}_{126} = -p_4 + M^x_{432},$$
$$\bar{a}_{127} = -(q_{41} + r_3), \quad \bar{a}_{128} = -p_3 + M^x_{442},$$
$$\bar{a}_{129} = -n_4 + P^x_{43}, \quad \bar{a}_{1210} = -n_3 + P^x_{44},$$
$$\bar{a}_{1211} = R^x_{43} + R^x_{44}, \quad \bar{a}_{1212} = -(l_1 + l_3),$$
$$\bar{a}_{1213} = -m_{31} + Q^x_{442}, \quad \bar{a}_{1214} = -m_{41} + Q^x_{432},$$
$$\bar{a}_{1215} = -(m_{32} + m_{42}), \quad \bar{a}_{12} = Q^x_{431} + Q^x_{441},$$
$$\bar{a}_{131} = -r_1 + L^x_{43}, \quad \bar{a}_{132} = L^x_{41},$$
$$\bar{a}_{133} = -r_3 + M^x_{441} + M^x_{432}, \quad \bar{a}_{134} = M^x_{412} + M^x_{431},$$
$$\bar{a}_{135} = -p_3 + N^x_{41}, \quad \bar{a}_{136} = -p_1 + N^x_{43},$$
$$\bar{a}_{137} = -(q_{12} + q_{32}), \quad \bar{a}_{138} = -(q_{11} + q_{31}),$$
$$\bar{a}_{139} = -m_{11} + Q^x_{431}, \quad \bar{a}_{1310} = -m_{32} + Q^x_{411},$$
$$\bar{a}_{1311} = -m_{12} + Q^x_{432}, \quad \bar{a}_{1312} = -m_{31} + Q^x_{412},$$
$$\bar{a}_{1313} = -(l_1 + l_3), \quad \bar{a}_{1314} = R^x_{41} + R^x_{42},$$
$$\bar{a}_{1315} = -(n_1 + n_3), \quad \bar{a}_{13} = P^x_{41} + P^x_{43},$$
$$\bar{a}_{141} = M^x_{421} + M^x_{442}, \quad \bar{a}_{142} = -r_2 + M^x_{422} + M^x_{441},$$
$$\bar{a}_{143} = L^x_{44}, \quad \bar{a}_{144} = -r_4 + L^x_{42},$$
$$\bar{a}_{145} = -(q_{21} + q_{42}), \quad \bar{a}_{146} = -(q_{22} + q_{41}),$$
$$\bar{a}_{147} = -p_4 + N^x_{42}, \quad \bar{a}_{148} = -p_2 + N^x_{44},$$
$$\bar{a}_{149} = -m_{42} + Q^x_{421}, \quad \bar{a}_{1410} = -m_{22} + Q^x_{441},$$
$$\bar{a}_{1411} = -m_{21} + Q^x_{442}, \quad \bar{a}_{1412} = -m_{41} + Q^x_{422},$$
$$\bar{a}_{1413} = R^x_{42} + R^x_{44}, \quad \bar{a}_{1414} = -(l_2 + l_4),$$
$$\bar{a}_{1415} = -(n_2 + n_4), \quad \bar{a}_{14} = P^x_{42} + P^x_{44},$$
$$\bar{a}_{151} = -p_1 + M^x_{422} + M^x_{441} + N^x_{43},$$
$$\bar{a}_{152} = -p_2 + M^x_{421} + M^x_{442} + N^x_{41},$$

$$\bar{a}_{153} = -p_3 + M^x_{421} + M^x_{441} + N^x_{44},$$
$$\bar{a}_{154} = -p_4 + M^x_{412} + M^x_{432} + N^x_{42},$$
$$\bar{a}_{155} = -(q_{22} + q_{41} + r_3) + L^x_{41}, \quad \bar{a}_{156} = -(q_{22} + q_{41} + r_1) + L^x_{42},$$
$$\bar{a}_{157} = -(q_{11} + q_{32} + r_4) + L^x_{43}, \quad \bar{a}_{158} = -(q_{11} + q_{31} + r_2) + L^x_{44},$$
$$\bar{a}_{159} = -(m_{12} + m_{41}) + Q^x_{422} + Q^x_{432},$$
$$\bar{a}_{1510} = -(m_{21} + m_{31}) + Q^x_{411} + Q^x_{441},$$
$$\bar{a}_{1511} = -(m_{11} + m_{22}) + Q^x_{431} + Q^x_{411},$$
$$\bar{a}_{1512} = -(m_{32} + m_{42}) + Q^x_{411} + Q^x_{422},$$
$$\bar{a}_{1513} = -(n_1 + n_3) + R^x_{42} + R^x_{44}, \; \bar{a}_{1514} = -(n_2 + n_4) + R^x_{41} + R^x_{43},$$
$$\bar{a}_{1515} = -(l_1 + l_2 + l_3 + l_4), \quad \bar{a}_{15} = P^x_{41} + P^x_{42} + P^x_{43} + P^x_{44},$$

де

$$p_f = \frac{1}{4}(K_{f1} - K_{f2} + K_{f3} - K_{f4} + K_{f5} - K_{f6} + K_{f7} - K_{f8}),$$
$$q_{f1} = \frac{1}{4}(K_{f1} - K_{f2} - K_{f3} + K_{f4} + K_{f5} + K_{f6} - K_{f7} - K_{f8}),$$
$$q_{f2} = \frac{1}{4}(K_{f1} - K_{f2} - K_{f3} + K_{f4} - K_{f5} - K_{f6} + K_{f7} + K_{f8}),$$
$$r_f = \frac{1}{4}(K_{f1} - K_{f2} + K_{f3} - K_{f4} - K_{f5} + K_{f6} - K_{f7} + K_{f8}),$$
$$n_f = \frac{1}{4}(K_{f1} + K_{f2} + K_{f3} + K_{f4} - K_{f5} - K_{f6} - K_{f7} - K_{f8}),$$
$$m_{f1} = \frac{1}{4}(K_{f1} + K_{f2} - K_{f3} - K_{f4} + K_{f5} - K_{f6} - K_{f7} + K_{f8}),$$
$$m_{f2} = \frac{1}{4}(K_{f1} + K_{f2} - K_{f3} - K_{f4} - K_{f5} + K_{f6} + K_{f7} - K_{f8}),$$
$$l_f = \frac{1}{4}(K_{f1} + K_{f2} + K_{f3} + K_{f4} + K_{f5} + K_{f6} + K_{f7} + K_{f8}),$$
$$P^x_{4f} = \frac{1}{4}(k_{f1}Z_{f1} - k_{f2}Z_{f2} + k_{f3}Z_{f3} - k_{f4}Z_{f4} + \\ + K_{f5}Z_{f5} - K_{f6}Z_{f6} + K_{f7}Z_{f7} - K_{f8}Z_{f8}),$$
$$Q^x_{4f1} = \frac{1}{4}(K_{f1}Z_{f1} - K_{f2}Z_{f2} - K_{f3}Z_{f3} + K_{f4}Z_{f4} + \\ + K_{f5}Z_{f5} + K_{f6}Z_{f6} - K_{f7}Z_{f7} - K_{f8}Z_{f8}),$$
$$Q^x_{4f2} = \frac{1}{4}(K_{f1}Z_{f1} - K_{f2}Z_{f2} - K_{f3}Z_{f3} + K_{f4}Z_{f4} - \\ - K_{f5}Z_{f5} - K_{f6}Z_{f6} + K_{f7}Z_{f7} + K_{f8}Z_{f8}),$$
$$R^x_{4f2} = \frac{1}{4}(K_{f1}Z_{f1} - K_{f2}Z_{f2} + K_{f3}Z_{f3} - K_{f4}Z_{f4} -$$

$$-K_{f5}Z_{f5}+K_{f6}Z_{f6}-K_{f7}Z_{f7}+K_{f8}Z_{f8}),$$
$$N^x_{4f}=\frac{1}{4}(K_{f1}Z_{f1}+K_{f2}Z_{f2}+K_{f3}Z_{f3}+K_{f4}Z_{f4}-$$
$$-K_{f5}Z_{f5}-K_{f6}Z_{f6}-K_{f7}Z_{f7}-K_{f8}Z_{f8}),$$
$$M^x_{4f1}=\frac{1}{4}(K_{f1}Z_{f1}+K_{f2}Z_{f2}-K_{f3}Z_{f3}-K_{f4}Z_{f4}+$$
$$+K_{f5}Z_{f5}-K_{f6}Z_{f6}-K_{f7}Z_{f7}+K_{f8}Z_{f8}),$$
$$M^x_{4f2}=\frac{1}{4}(K_{f1}Z_{f1}+K_{f2}Z_{f2}-K_{f3}Z_{f3}-K_{f4}Z_{f4}-$$
$$-K_{f5}Z_{f5}+K_{f6}Z_{f6}+K_{f7}Z_{f7}-K_{f8}Z_{f8}),$$
$$L^x_{4f}=\frac{1}{4}(K_{f1}Z_{f1}+K_{f2}Z_{f2}+K_{f3}Z_{f3}+K_{f4}Z_{f4}+$$
$$+K_{f5}Z_{f5}+K_{f6}Z_{f6}+K_{f7}Z_{f7}+K_{f8}Z_{f8}).$$

В одночастинковому наближенні

$$\frac{d}{dt}\eta_f^{(1)x}=-2\bar{K}_f\eta_f^{(1)x}+2\bar{K}_f\mathrm{th}\frac{\bar{x}_{f4}}{2}, \tag{3.16}$$

де $\bar{K}_f=\int\limits_0^\infty dte^{-\varepsilon t}\cos\bar{\Omega}^x t\mathrm{Re}[\langle\bar{u}^-(t)\bar{u}^+\rangle_q+\langle\bar{u}^+(t)\bar{u}^-\rangle_q]$.

У випадку $K_{f\mu}=K=1/2\alpha$ отримана система кінетичних рівнянь (3.15) переходить у систему рівнянь, яка одержана в роботі [39] в рамках стохастичної моделі Глаубера.

4. Системи рівнянь для залежних від часу функцій розподілу дейтронів кристалу $ND_4D_2PO_4$ при прикладанні зовнішнього електричного поля E_3

Кінетичне рівняння, яке визначає динаміку псевдоспінових операторів, має наступний вигляд [30–32]:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{P}_m\rangle=-\sum_{qf}\sum_{\mu\alpha}\left\{k^\alpha_{f\mu}Q^-_{qf\mu\alpha}(\hat{p}_m)+k^\alpha_{f\mu}\mathrm{th}\frac{\beta\Omega^z_{qf\mu}}{2}Q^+_{qf\mu\alpha}(\hat{p}_m)\right\},$$
$$(\alpha=0,+,-), \tag{4.1}$$

де використані такі позначення:

$$Q^{\mp}_{qf\mu\alpha}(\hat{P}_m)=\langle\Big[\big[\hat{P}_m,S^{-\alpha}_{qf}(\Omega^\alpha_{qf\mu})\big],S^\alpha_{qf}(\Omega^\alpha_{qf\mu})\Big]^{\mp}\rangle_q, \tag{4.2}$$

$$K^\alpha_{f\mu}=\int\limits_0^\infty dte^{-\varepsilon t}\cos(\Omega^z_{f\mu}t)\mathrm{Re}\big[\langle\bar{u}^{-\alpha}(t)\bar{u}^\alpha\rangle_q\big], \tag{4.3}$$

а $\bar{u}^{-\alpha}(t)$, $\bar{u}^\alpha$ – оператори, що залежать від змінних гратки термостата, $\Omega^z_{qf\mu}$ – власні значення чотиричастинкового гамільтоніана [47]

$$\hat{H}_{q(4)}=\left(-\frac{1}{8}\delta_{s6}\varepsilon_6+\frac{1}{4}\delta_{16}\varepsilon_6\right)(\sigma_{q1}+\sigma_{q2}+\sigma_{q3}+\sigma_{q4})+ \tag{4.4}$$
$$+\left(-\frac{1}{8}\delta_{s6}\varepsilon_6-\frac{1}{4}\delta_{16}\varepsilon_6\right)(\sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q3}+\sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q4}+$$
$$+\sigma_{q1}\sigma_{q3}\sigma_{q4}+\sigma_{q2}\sigma_{q3}\sigma_{q4})+(V_a+\delta_{a6}\varepsilon_6)\left(\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q2}}{2}+\frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2}\right)+$$
$$+(V_a-\delta_{a6}\varepsilon_6)\left(\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}+\frac{\sigma_{q4}}{2}\frac{\sigma_{q1}}{2}\right)+$$
$$+U_a\left(\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}+\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2}\right)+\Phi_a\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2}-$$
$$-\frac{1}{2\beta}x_q(-\sigma_{q1}+\sigma_{q2}+\sigma_{q3}-\sigma_{q4})-\frac{1}{2\beta}z(\sigma_{q1}+\sigma_{q2}+\sigma_{q3}+\sigma_{q4}),$$

і одночастинкових гамільтоніанів

$$\hat{H}_{q1}(6)=-\frac{\bar{x}_q}{\beta}\frac{\sigma_{q1}}{2}+\frac{\bar{z}}{\beta}\frac{\sigma_{q1}}{2},\ \hat{H}_{q2}(6)=\frac{\bar{x}_q}{\beta}\frac{\sigma_{q2}}{2}+\frac{\bar{z}}{\beta}\frac{\sigma_{q2}}{2},$$
$$\hat{H}_{q3}(6)=\frac{\bar{x}_q}{\beta}\frac{\sigma_{q3}}{2}+\frac{\bar{z}}{\beta}\frac{\sigma_{q3}}{2},\ \hat{H}_{q4}(6)=-\frac{\bar{x}_q}{\beta}\frac{\sigma_{q4}}{2}+\frac{\bar{z}}{\beta}\frac{\sigma_{q4}}{2}, \tag{4.5}$$

де використані такі позначення:

$$x_q=\beta\left[-\Delta_a e^{i\mathbf{k}^z\mathbf{a}_q}+2\nu_a(\mathbf{k}^z)\eta^{(1)}e^{i\mathbf{k}^z\mathbf{a}_q}\right],\ \bar{x}_q=-\beta\Delta_a e^{i\mathbf{k}^z\mathbf{a}_q}+x_q,$$
$$z=\beta\big[-\Delta_c+2\nu_c(0)\eta^{(1)z}-2\psi_6\varepsilon_6+\mu_3E_3\big],$$

а

$$V_a=\frac{1}{2}\varepsilon'-\frac{1}{2}w_1',\ U_a=\frac{1}{2}\varepsilon'+\frac{1}{2}w_1',\ \Phi_a=2\varepsilon'-8w'+2w_1',$$

де $\varepsilon'=\varepsilon_s-\varepsilon_0$, $w'=\varepsilon_1-\varepsilon_a$, $w_1'=\varepsilon_0-\varepsilon_a$.

Для знаходження виразів $\Omega^z_{qf\mu}$ визначимо закон еволюції псевдоспінових операторів $\sigma^\alpha_{qf}(t)$ таким чином:

$$\sigma^\alpha_{qf}(t)=\exp\left[i\hat{H}^{(4)}_{q6}t\right]\sigma^\alpha_{qf}\exp\left[-i\hat{H}^{(4)}_{q6}t\right]=$$
$$=\sigma^\alpha_{qf}+it\left[\hat{H}^{(4)}_{q6},\sigma^\alpha_{qf}\right]+\frac{1}{2!}(it)^2\left[\hat{H}^{(4)}_{q6},\left[\hat{H}^{(4)}_{q6},\sigma^\alpha_{qf}\right]\right]+\ldots \tag{4.6}$$

Використовуючи переставочні співвідношення для спінових операторів, отримуємо закон еволюції псевдоспінових операторів у наступному вигляді:

$$\sigma^\alpha_{qf}(t)=\sigma^\alpha_{qf}\exp\big(-i\alpha t\bar{\Omega}^z_{qf}\big), \tag{4.7}$$

де

$$\bar{\Omega}^z_{q1} = -\Big[(V_a+\delta_{a6}\varepsilon_6)\frac{\sigma_{q2}}{2} + (V_a-\delta_{a6}\varepsilon_6)\frac{\sigma_{q4}}{2} + U_a\frac{\sigma_{q3}}{2} +$$
$$+\Phi_a\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} - \varepsilon_6(\delta_{s6}+2\delta_{16})\left(\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2} + \frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} + \frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2}\right) +$$
$$+\varepsilon_6\left(-\frac{\delta_{s6}}{4}+\frac{\delta_{16}}{2}\right) + \frac{x_q}{\beta} - \frac{z}{\beta}\Big],$$
$$\bar{\Omega}^z_{q2} = -\Big[(V_a+\delta_{a6}\varepsilon_6)\frac{\sigma_{q1}}{2} + (V_a-\delta_{a6}\varepsilon_6)\frac{\sigma_{q3}}{2} + U_a\frac{\sigma_{q4}}{2} +$$
$$+\Phi_a\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} - \varepsilon_6(\delta_{s6}+2\delta_{16})\left(\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} + \frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} + \frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}\right) +$$
$$+\varepsilon_6\left(-\frac{\delta_{s6}}{4}+\frac{\delta_{16}}{2}\right) - \frac{x_q}{\beta} - \frac{z}{\beta}\Big],$$
$$\bar{\Omega}^z_{q3} = -\Big[(V_a+\delta_{a6}\varepsilon_6)\frac{\sigma_{q4}}{2} + (V_a-\delta_{a6}\varepsilon_6)\frac{\sigma_{q2}}{2} + U_a\frac{\sigma_{q1}}{2} +$$
$$+\Phi_a\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} - \varepsilon_6(\delta_{s6}+2\delta_{16})\left(\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q2}}{2} + \frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} + \frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2}\right) +$$
$$+\varepsilon_6\left(-\frac{\delta_{s6}}{4}+\frac{\delta_{16}}{2}\right) - \frac{x_q}{\beta} - \frac{z}{\beta}\Big],$$
$$\bar{\Omega}^z_{q4} = -\Big[(V_a+\delta_{a6}\varepsilon_6)\frac{\sigma_{q3}}{2} + (V_a-\delta_{a6}\varepsilon_6)\frac{\sigma_{q1}}{2} + U_a\frac{\sigma_{q2}}{2} +$$
$$+\Phi_a\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} - \varepsilon_6(\delta_{s6}+2\delta_{16})\left(\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q2}}{2} + \frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2} + \frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}\right) +$$
$$+\varepsilon_6\left(-\frac{\delta_{s6}}{4}+\frac{\delta_{16}}{2}\right) + \frac{x_q}{\beta} - \frac{z}{\beta}\Big].$$

В одночастинковому наближенні закон еволюції псевдоспінових операторів має такий вигляд:

$$\sigma^\alpha_{q\,{}^1_4}(t) = \sigma^\alpha_{q\,{}^1_4}\exp\left[-i\alpha t\bar{\Omega}^z_{q1}\right],$$
$$\sigma^\alpha_{q\,{}^2_3}(t) = \sigma^\alpha_{q\,{}^2_3}\exp\left[-i\alpha t\bar{\Omega}^z_{q2}\right], \quad (4.8)$$

де $\bar{\Omega}^z_{q1} = \frac{x_q}{\beta} - \frac{z}{\beta}$, $\bar{\Omega}^z_{q2} = -\frac{x_q}{\beta} - \frac{z}{\beta}$.

Враховуючи, що псевдоспінові оператори σ_{qf} набувають значень ± 1, власні значення гамільтоніана (4.4) набувають вигляду:

$$\Omega^z_{q14\,{}^1_2} = \Omega^z_{q1\,{}^1_2} = \Omega^z_{q4\,{}^1_2} = \mp(\varepsilon'-w') + (\delta_{s6}+\delta_{16})\varepsilon_6 - \frac{x_q}{\beta} + \frac{z}{\beta},$$
$$\Omega^z_{q14\,{}^3_4} = \Omega^z_{q1\,{}^3_4} = \Omega^z_{q4\,{}^3_4} = \mp(w'-w'_1) - \delta_{16}\varepsilon_6 - \frac{x_q}{\beta} + \frac{z}{\beta},$$
$$\Omega^z_{q14\,{}^5_6} = \Omega^z_{q1\,{}^5_6} = \Omega^z_{q4\,{}^5_6} = \mp w' - (\pm\delta_{a6}+\delta_{16})\varepsilon_6 - \frac{x_q}{\beta} + \frac{z}{\beta},$$
$$\Omega^z_{q14\,{}^7_8} = \Omega^z_{q1\,{}^7_8} = \Omega^z_{q4\,{}^7_8} = \mp w' - (\mp\delta_{a6}+\delta_{16})\varepsilon_6 - \frac{x_q}{\beta} + \frac{z}{\beta}, \quad (4.9)$$
$$\Omega^z_{q23\,{}^1_2} = \Omega^z_{q2\,{}^1_2} = \Omega^z_{q3\,{}^1_2} = \mp(\varepsilon'-w') + (\delta_{s6}+\delta_{16})\varepsilon_6 + \frac{x_q}{\beta} + \frac{z}{\beta},$$
$$\Omega^z_{q23\,{}^3_4} = \Omega^z_{q2\,{}^3_4} = \Omega^z_{q3\,{}^3_4} = \mp(w'-w'_1) - \delta_{16}\varepsilon_6 + \frac{x_q}{\beta} + \frac{z}{\beta},$$
$$\Omega^z_{q23\,{}^5_6} = \Omega^z_{q2\,{}^5_6} = \Omega^z_{q3\,{}^5_6} = \mp w' - (\pm\delta_{a6}+\delta_{16})\varepsilon_6 + \frac{x_q}{\beta} + \frac{z}{\beta},$$
$$\Omega^z_{q23\,{}^7_8} = \Omega^z_{q2\,{}^7_8} = \Omega^z_{q3\,{}^7_8} = \mp w' - (\mp\delta_{a6}+\delta_{16})\varepsilon_6 + \frac{x_q}{\beta} + \frac{z}{\beta}.$$

Вираз (4.7) можна записати у такому вигляді:

$$\sigma^\alpha_{qf}(t) = \sum_{\mu=1}^{8}\sigma^\alpha_{qf}(\Omega^z_{qf\mu})e^{-it\alpha\Omega^z_{qf\mu}} =$$
$$= \sigma^\alpha_{qf}\sum_{\mu=1}^{8}R_{qf}(\Omega^z_{qf\mu})e^{-it\alpha\Omega^z_{qf\mu}}, \quad (4.10)$$

де $R_{qf}(\Omega^z_{qf\mu})$ збігається з $R_{qf}(\Omega^z_\mu)$ (2.11).

Кінетичне рівняння (4.1) після розрахунку виразів (4.2) отримується у такому вигляді:

$$\frac{d}{dt}\langle\prod_{f\{1\ldots4\}}\sigma_{qf}\rangle = -2\sum_{\mu=1}^{8}\Big[\langle\prod_{f\{1\ldots4\}}\sigma_{qf}\sum_{f\{1\ldots4\}}K_{f\mu}R_{qf}(\Omega^z_{qf\mu}) -$$
$$-\langle\prod_{f\{1\ldots4\}}\sigma_{qf}\sum_{f\{1\ldots4\}}K_{f\mu}Z_{qf\mu}\sigma_{qf}R_{qf}(\Omega^z_{qf\mu})\rangle\Big]. \quad (4.11)$$

де

$$Z_{q14\mu} = \mathrm{th}\frac{\beta}{2}\Omega^z_{q14\mu} = Z_{q1\mu} = Z_{q4\mu},$$
$$Z_{q23\mu} = \mathrm{th}\frac{\beta}{2}\Omega^z_{q23\mu} = Z_{q2\mu} = Z_{q3\mu}, \quad (4.12)$$
$$K_{f\mu} = \int_0^\infty dte^{-\varepsilon t}\cos(\Omega^z_{f\mu}t)\mathrm{Re}\left[\langle\bar{u}^-(t)\bar{u}^+\rangle_q + \langle\bar{u}^+(t)\bar{u}^-\rangle_q\right].$$

При прикладанні до кристалу електричного поля E_3 функції розподілу дейтронів мають наступну симетрію:

$$\eta^{(1)z}_{q14} = \langle\sigma_{q1}\rangle = \langle\sigma_{q4}\rangle, \quad \eta^{(1)z}_{q23} = \langle\sigma_{q2}\rangle = \langle\sigma_{q3}\rangle,$$

$$
\begin{aligned}
\eta^{(3)z}_{q14} &= \langle\sigma_{q2}\sigma_{q3}\sigma_{q4}\rangle = \langle\sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q3}\rangle,\\
\eta^{(3)z}_{q23} &= \langle\sigma_{q1}\sigma_{q3}\sigma_{q4}\rangle = \langle\sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q4}\rangle,\\
\eta^{(2)z}_{q14} &= \langle\sigma_{q1}\sigma_{q4}\rangle, \quad \eta^{(2)z}_{q23} = \langle\sigma_{q2}\sigma_{q3}\rangle,\\
\eta^{(2)z}_{q2} &= -\langle\sigma_{q1}\sigma_{q2}\rangle = -\langle\sigma_{q3}\sigma_{q4}\rangle,\\
\eta^{(2)z}_{q3} &= -\langle\sigma_{q1}\sigma_{q3}\rangle = -\langle\sigma_{q2}\sigma_{q4}\rangle.
\end{aligned}
\tag{4.13}
$$

Враховуючи вирази (4.13), на основі рівнянь (4.11) отримуємо систему рівнянь для залежних від часу функцій розподілу дейтронів $ND_4D_2PO_4$:

$$
\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}\eta^{(1)z}_{q14}\\ \eta^{(1)z}_{q23}\\ \eta^{(3)z}_{q14}\\ \eta^{(3)z}_{q23}\\ \eta^{(2)z}_{q14}\\ \eta^{(2)z}_{q23}\\ \eta^{(2)z}_{q2}\\ \eta^{(2)z}_{q3}\\ \eta^{(4)z}_{q}\end{pmatrix}
=\begin{pmatrix}
\bar c_{q11} & \bar c_{q12} & \dots & \bar c_{q19}\\
\bar c_{q21} & \bar c_{q22} & \dots & \bar c_{q29}\\
\bar c_{q31} & \bar c_{q32} & \dots & \bar c_{q39}\\
\bar c_{q41} & \bar c_{q42} & \dots & \bar c_{q49}\\
\bar c_{q51} & \bar c_{q52} & \dots & \bar c_{q59}\\
\bar c_{q61} & \bar c_{q62} & \dots & \bar c_{q69}\\
\bar c_{q71} & \bar c_{q72} & \dots & \bar c_{q79}\\
\bar c_{q81} & \bar c_{q82} & \dots & \bar c_{q89}\\
\bar c_{q91} & \bar c_{q92} & \dots & \bar c_{q99}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}\eta^{(1)z}_{q14}\\ \eta^{(1)z}_{q23}\\ \eta^{(3)z}_{q14}\\ \eta^{(3)z}_{q23}\\ \eta^{(2)z}_{q14}\\ \eta^{(2)z}_{q23}\\ \eta^{(2)z}_{q2}\\ \eta^{(2)z}_{q3}\\ \eta^{(4)z}_{q}\end{pmatrix}
+\begin{pmatrix}\bar c_{q1}\\ \bar c_{q2}\\ \bar c_{q3}\\ \bar c_{q4}\\ \bar c_{q5}\\ \bar c_{q6}\\ \bar c_{q7}\\ \bar c_{q8}\\ \bar c_{q9}\end{pmatrix}. \tag{4.14}
$$

Тут використані наступні позначення:

$$
\begin{aligned}
&\bar c_{q11} = -l_{14} + Q^z_{q142}, \quad \bar c_{q12} = P^z_{q14} + Q^z_{q14},\\
&\bar c_{q13} = -m_{142} + R^z_{q14}, \quad \bar c_{q14} = -(n_{14} + m_{141}),\\
&\bar c_{q15} = -q_{142}, \quad \bar c_{q16} = M^z_{q141}\\
&\bar c_{q17} = q_{141} + M^z_{q142}, \quad \bar c_{q18} = r_{14} + N^z_{q14},\\
&\bar c_{q19} = -p_{14}, \quad \bar c_{q1} = L^z_{q14},\\
&\bar c_{q21} = P^z_{q23} + Q^z_{q23}, \quad \bar c_{q22} = -l_{23} + Q^z_{q232},\\
&\bar c_{q23} = -(n_{23} + m_{232}), \quad \bar c_{q24} = -m_{231} + R^z_{q23},\\
&\bar c_{q25} = M^z_{q231}, \quad \bar c_{q26} = -q_{231},\\
&\bar c_{q27} = q_{232} + M^z_{q232}, \quad \bar c_{q28} = r_{23} + N^z_{q23},\\
&\bar c_{q29} = -p_{23}, \quad \bar c_{q2} = L^z_{q23},\\
&\bar c_{q31} = -m_{142} + R^z_{q14} + 2Q^z_{q132} + 2R^z_{q23},\\
&\bar c_{q32} = -(n_{23} + m_{232}) + P^z_{q14} + Q^z_{q142} + P^z_{q23} + Q^z_{q231},\\
&\bar c_{q33} = -(l_{14} + 2l_{23} + 2m_{232}) + Q^z_{q142},\\
&\bar c_{q34} = -(n_{14} + n_{23} + m_{142} + m_{232}) + P^z_{q23} + Q^z_{q231},
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&\bar c_{q35} = -p_{14} + N^z_{q23} + M^z_{q232}, \quad \bar c_{q36} = -(q_{232} + r_{23}) + L^z_{q14},\\
&\bar c_{q37} = q_{231} + r_{14} + p_{23} + N^z_{q14} + M^z_{q231} + L^z_{q23},\\
&\bar c_{q38} = q_{142} + q_{231} + p_{23} + M^z_{q142} + M^z_{q231} + L^z_{q23},\\
&\bar c_{q39} = -(q_{141} + q_{232} + r_{23}), \quad \bar c_{q3} = M^z_{q141} + N^z_{q23} + M^z_{q232},\\
&\bar c_{q41} = -(n_{14} + m_{141}) + P^z_{q14} + Q^z_{q141} + P^z_{q231} + Q^z_{q231},\\
&\bar c_{q42} = -m_{231}) + 2Q^z_{q143} + 2R^z_{q14} + R^z_{q23},\\
&\bar c_{q43} = -(n_{14} + n_{23} + m_{142} + m_{232}) + P^z_{q14} + Q^z_{q141},\\
&\bar c_{q44} = -2(n_{14} + n_{23} + m_{142} + m_{232}) + P^z_{q14} + Q^z_{q141},\\
&\bar c_{q45} = -(q_{142} + r_{14}) + L^z_{q23}, \quad \bar c_{q46} = -p_{23} + N^z_{q142} + M^z_{q142},\\
&\bar c_{q47} = q_{141} + r_{23} + p_{14} + M^z_{q141} + L^z_{q14} + N^z_{q23},\\
&\bar c_{q48} = q_{142} + q_{232} + p_{14} + M^z_{q141} + L^z_{q14} + N^z_{q231},\\
&\bar c_{q49} = -(q_{142} + q_{231} + r_{14}), \quad \bar c_{q4} = N^z_{q14} + M^z_{q142} + M^z_{q231},\\
&\bar c_{q51} = -(q_{141} + q_{142}) + 2L^z_{q14}, \quad \bar c_{q52} = 2N^z_{q14} + 2M^z_{q142},\\
&\bar c_{q53} = -2p_{14} + 2M^z_{q141}, \quad \bar c_{q54} = -(q_{141} + 2r_{14}),\\
&\bar c_{q55} = -2l_{14}, \quad \bar c_{q56} = 2R^z_{q14},\\
&\bar c_{q57} = 2n_{14} + 2P^z_{q4}, \quad \bar c_{q58} = 2m_{141} + 2Q^z_{q141},\\
&\bar c_{q59} = -(m_{141} + m_{142}), \quad \bar c_{q5} = Q^z_{q142} + Q^z_{q232},\\
&\bar c_{q61} = 2N^z_{q23} + 2M^z_{q232}, \quad \bar c_{q62} = -(q_{231} + q_{232}) + 2L^z_{q23},\\
&\bar c_{q63} = -(q_{232} + 2r_{23}), \quad \bar c_{q64} = -2p_{23} + 2M^z_{q232},\\
&\bar c_{q65} = 2R^z_{q23}, \quad \bar c_{q66} = -2l_{23},\\
&\bar c_{q67} = 2n_{23} + 2P^z_{q23}, \quad \bar c_{q68} = 2m_{232} + 2Q^z_{q231},\\
&\bar c_{q69} = -(m_{231} + m_{232}), \quad \bar c_{q6} = 2Q^z_{q232},\\
&\bar c_{q71} = -q_{141} + N^z_{q14} + M^z_{q231} + L^z_{q23},\\
&\bar c_{q72} = -q_{232} + M^z_{q141} + L^z_{q14} + N^z_{q23},\\
&\bar c_{q73} = -(q_{231} + r_{14} + p_{23}) + M^z_{q142},\\
&\bar c_{q74} = -(q_{142} + r_{23} + p_{14}) + M^z_{q232},\\
&\bar c_{q75} = -n_{14} + P^z_{q23}, \quad \bar c_{q76} = -n_{23} + P^z_{q14},\\
&\bar c_{q77} = -(l_{14} + l_{23}) + R^z_{q14} + R^z_{q23},\\
&\bar c_{q78} = m_{242} + m_{231} + Q^z_{q142} + Q^z_{q232},\\
&\bar c_{q79} = -(m_{141} + m_{232}), \quad \bar c_{q7} = Q^z_{q141} + Q^z_{q231},\\
&\bar c_{q81} = -r_{14} + M^z_{q14} + M^z_{q23} + L^z_{q23},\\
&\bar c_{q82} = -r_{23} + M^z_{q14} + L^z_{q14} + M^z_{q23},\\
&\bar c_{q83} = -(q_{141} + q_{231} + p_{23}) + N^z_{q14},
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&\bar{c}_{q84} = -(q_{142} + q_{232} + p_{14}) + N^z_{q23},\\
&\bar{c}_{q85} = -m_{141} + Q^z_{q232}, \quad \bar{c}_{q86} = -m_{232} + Q^z_{q141},\\
&\bar{c}_{q87} = m_{142} + m_{231} + Q^z_{q141} + Q^z_{q232},\\
&\bar{c}_{q88} = -(l_{14} + l_{23}) + R^z_{q14} + R^z_{q23},\\
&\bar{c}_{q89} = -(n_{14} + n_{23}), \quad \bar{c}_{q8} = P^z_{q14} + P^z_{q23},\\
&\bar{c}_{q91} = -2p_{14} + 2P^z_{q14} + M^z_{q232} + M^z_{q142} + 2N^z_{q23},\\
&\bar{c}_{q92} = -2p_{23} + 2P^z_{q23} + M^z_{q141} + M^z_{q231} + 2N^z_{q14},\\
&\bar{c}_{q93} = -(2q_{141} + 2q_{232} + 2r_{23}) + 2L^z_{q14},\\
&\bar{c}_{q94} = -(2q_{141} + 2q_{232} + 2r_{14}) + 2L^z_{q23},\\
&\bar{c}_{q95} = -(m_{141} + m_{142}) + 2Q^z_{q232}, \quad \bar{c}_{q96} = -2m_{231} + 2Q^z_{q141},\\
&\bar{c}_{q97} = (m_{141} + m_{142} + 2m_{232}) + Q^z_{q141} + 2Q^z_{q231},\\
&\bar{c}_{q98} = 2(n_{14} + n_{23}) + 2R^z_{q14} + 2R^z_{q23},\\
&\bar{c}_{q99} = -(2l_{14} + 2l_{23}), \quad \bar{c}_{q9} = 2P^z_{q14} + 2P^z_{q23},
\end{aligned}
$$

де

$$
\begin{aligned}
&p_f = \frac{1}{4}\big(K_{f1} - K_{f2} + K_{f3} - K_{f4} + K_{f5} - K_{f6} + K_{f7} - K_{f8}\big), \left(f = \begin{matrix}13\\24\end{matrix}\right),\\
&q_{f1} = \frac{1}{4}\big(K_{f1} - K_{f2} - K_{f3} + K_{f4} + K_{f5} + K_{f6} - K_{f7} - K_{f8}\big),\\
&q_{f2} = \frac{1}{4}\big(K_{f1} - K_{f2} - K_{f3} + K_{f4} - K_{f5} - K_{f6} + K_{f7} + K_{f8}\big),\\
&r_f = \frac{1}{4}\big(K_{f1} - K_{f2} + K_{f3} - K_{f4} - K_{f5} + K_{f6} - K_{f7} + K_{f8}\big),\\
&n_f = \frac{1}{4}\big(K_{f1} + K_{f2} + K_{f3} + K_{f4} - K_{f5} - K_{f6} - K_{f7} - K_{f8}\big),\\
&m_{f1} = \frac{1}{4}\big(K_{f1} + K_{f2} - K_{f3} - K_{f4} + K_{f5} - K_{f6} - K_{f7} + K_{f8}\big),\\
&m_{f2} = \frac{1}{4}\big(K_{f1} + K_{f2} - K_{f3} - K_{f4} - K_{f5} + K_{f6} + K_{f7} - K_{f8}\big),\\
&l_f = \frac{1}{4}\big(K_{f1} + K_{f2} + K_{f3} + K_{f4} + K_{f5} + K_{f6} + K_{f7} + K_{f8}\big),
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
P^z_{qf} &= \frac{1}{4}\big(K_{f1}Z_{qf1} - K_{f2}Z_{qf2} + K_{f3}Z_{qf3} - K_{f4}Z_{qf4} + K_{f5}Z_{qf5} -\\
&\quad -K_{f6}Z_{qf6} + K_{f7}Z_{qf7} - K_{f8}Z_{qf8}\big), \quad \left(f = \begin{matrix}13\\24\end{matrix}\right),\\
Q^z_{qf1} &= \frac{1}{4}\big(K_{f1}Z_{qf1} - K_{f2}Z_{qf2} - K_{f3}Z_{qf3} + K_{f4}Z_{qf4} + K_{f5}Z_{qf5} +\\
&\quad +K_{f6}Z_{qf6} - K_{f7}Z_{qf7} - K_{f8}Z_{qf8}\big),\\
Q^z_{qf2} &= \frac{1}{4}\big(K_{f1}Z_{qf1} - K_{f2}Z_{qf2} - K_{f3}Z_{qf3} + K_{f4}Z_{qf4} - K_{f5}Z_{qf5} -\\
&\quad -K_{f6}Z_{qf6} + K_{f7}Z_{qf7} + K_{f8}Z_{qf8}\big),\\
R^z_{qf} &= \frac{1}{4}\big(K_{f1}Z_{qf1} - K_{f2}Z_{qf2} + K_{f3}Z_{qf3} - K_{f4}Z_{qf4} - K_{f5}Z_{qf5} +\\
&\quad +K_{f6}Z_{qf6} - K_{f7}Z_{qf7} + K_{f8}Z_{qf8}\big),\\
N^z_{qf} &= \frac{1}{4}\big(K_{f1}Z_{qf1} + K_{f2}Z_{qf2} + K_{f3}Z_{qf3} + K_{f4}Z_{qf4} - K_{f5}Z_{qf5} -\\
&\quad -K_{f6}Z_{qf6} - K_{f7}Z_{qf7} - K_{f8}Z_{qf8}\big),\\
M^z_{qf1} &= \frac{1}{4}\big(K_{f1}Z_{qf1} + K_{f2}Z_{qf2} - K_{f3}Z_{qf3} - K_{f4}Z_{qf4} + K_{f5}Z_{qf5} -\\
&\quad -K_{f6}Z_{qf6} - K_{f7}Z_{qf7} + K_{f8}Z_{qf8}\big),\\
M^z_{qf2} &= \frac{1}{4}\big(K_{f1}Z_{qf1} + K_{f2}Z_{qf2} - K_{f3}Z_{qf3} - K_{f4}Z_{qf4} - K_{f5}Z_{qf5} +\\
&\quad +K_{f6}Z_{qf6} + K_{f7}Z_{qf7} - K_{f8}Z_{qf8}\big),\\
L^z_{qf} &= \frac{1}{4}\big(K_{f1}Z_{qf1} + K_{f2}Z_{qf2} + K_{f3}Z_{qf3} + K_{f4}Z_{qf4} + K_{f5}Z_{qf5} +\\
&\quad +K_{f6}Z_{qf6} + K_{f7}Z_{qf7} + K_{f8}Z_{qf8}\big).
\end{aligned}
$$

В одночастинковому наближенні

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\eta^{(1)z}_{q14} &= -2\bar{K}_{14}\eta^{(1)z}_{q14} + 2\bar{K}_{14}\,\mathrm{th}\frac{\bar{\Omega}^z_{q1}}{2},\\
\frac{d}{dt}\eta^{(1)z}_{q23} &= -2\bar{K}_{23}\eta^{(1)z}_{q23} + 2\bar{K}_{23}\,\mathrm{th}\frac{\bar{\Omega}^z_{q2}}{2}.
\end{aligned} \tag{4.15}
$$

У випадку $K_{f\mu} = K = \frac{1}{2\alpha}$ система кінетичних рівнянь (4.14) переходить у систему рівнянь, яка отримана в рамках стохастичної моделі Глаубера в роботі [47].

5. Системи рівнянь для залежних від часу функцій розподілу дейтронів кристалу $ND_4D_2PO_4$ при прикладанні зовнішнього поля E_1

Кінетичне рівняння, яке визначає динаміку псевдоспінових операторів, має наступний вигляд [30–32]:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{p}_m\rangle = -\sum_{qf}\sum_{\mu\alpha}\left\{K^{\alpha}_{f\mu}Q^{-}_{qf\mu\alpha}(\hat{p}_m) + K^{\alpha}_{f\mu}\mathrm{th}\frac{\beta\Omega^x_{qf\mu}}{2}Q^{+}_{qf\mu\alpha}(\hat{p}_m)\right\}, \tag{5.1}$$

де використані наступні позначення:

$$Q^{\mp}_{qf\mu\alpha}(\hat{p}_m) = \langle\left[\hat{p}_m, S^{-\alpha}_{qf}(\Omega^{\alpha}_{qf\mu}), S^{\alpha}_{qf}(\Omega^{\alpha}_{qf\mu})\right]^{\mp}\rangle_q, \tag{5.2}$$

$$K^{\alpha}_{f\mu} = \int\limits_0^{\infty} dt e^{-st}\cos\bigl(\Omega^x_{f\mu}t\bigr)\mathrm{Re}\bigl[\langle\bar{u}^{-\alpha}(t)\bar{u}^{\alpha}\rangle_q\bigr], \tag{5.3}$$

а $\Omega^x_{qf\mu}$ – власні значення чотиричастинкового гамільтоніана [47]

$$\begin{aligned}\hat{H}^{(4)}_{q4}(4) &= \frac{1}{4}V_a(\sigma_{q1}\sigma_{q2}+\sigma_{q2}\sigma_{q3}+\sigma_{q3}\sigma_{q4}+\sigma_{q4}\sigma_{q1}) + \\ &+\frac{1}{4}U_a(\sigma_{q1}\sigma_{q3}+\sigma_{q2}\sigma_{q4}) + \frac{1}{16}\Phi_a\sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q3}\sigma_{q4} + \\ &+\frac{1}{4}(\delta_{a4}-\delta_{14})\varepsilon_4(\sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q4}-\sigma_{q2}\sigma_{q3}\sigma_{q4}) + \\ &+\frac{1}{4}(\delta_{a4}+\delta_{14})\varepsilon_4(-\sigma_{q1}+\sigma_{q3}) - \sum_{f=1}^{4}\frac{x_{qf4}}{\beta}\frac{\sigma_{qf}}{2}\end{aligned} \tag{5.4}$$

і одночастинкових гамільтоніанів

$$\hat{H}^{(1)}_{q1}(4) = -\frac{\bar{x}_{q13}}{\beta}\frac{\sigma_{q1}}{2}, \quad \hat{H}^{(1)}_{q2}(4) = \frac{\bar{x}_{q24}}{\beta}\frac{\sigma_{q2}}{2}, \tag{5.5}$$

У (5.4) і (5.5) використані наступні позначення:

$$\begin{aligned}&x_{q13} = -x_{q14} = x_{q34} = \\ &= \beta\bigl[-\Delta^a_{q13} + 2\nu_a(\mathbf{k}^z)\eta^{(1)}e^{i\mathbf{k}^z\mathbf{a}_q} + 2\nu_a(0)\eta^{(1)x}_{13} + 2\psi_4\varepsilon_4 + \mu_1 E_1\bigr], \\ &x_{q24} = x_{q34} = -x_{q44} = \beta\left[\Delta^a_{q24} + 2\nu_a(\mathbf{k}^z)\eta^{(1)}e^{i\mathbf{k}^z\mathbf{a}_q} + 2\nu_a(0)\eta^{(1)x}_{24}\right], \\ &\bar{x}_{qf4} = -\beta\Delta^a_{qf} + x_{qf4}.\end{aligned}$$

Для знаходження виразів $\Omega^x_{qf\mu}$ визначимо закон еволюції псевдоспінових операторів $\sigma^{\alpha}_{qf}(t)$ наступним чином:

$$\begin{aligned}\sigma^{\alpha}_{qf}(t) &= \exp\left[i\hat{H}^{(4)}_{q4}t\right]\sigma^{\alpha}_{qf}\exp\left[-i\hat{H}^{(4)}_{q4}t\right] = \\ &= \sigma^{\alpha}_{qf} + it\left[\hat{H}^{(4)}_{q4},\sigma^{\alpha}_{qf}\right] + \frac{1}{2!}(it)^2\left[\hat{H}^{(4)}_{q4},\left[\hat{H}^{(4)}_{q4},\sigma^{\alpha}_{qf}\right]\right] + \ldots\end{aligned} \tag{5.6}$$

Використовуючи переставочні співвідношення для спінових операторів, отримуємо закон еволюції псевдоспінових операторів у такому вигляді:

$$\sigma^{\alpha}_{qf}(t) = \sigma^{\alpha}_{qf}\exp\bigl(-i\alpha + \bar{\Omega}^x_{qf}\bigr), \tag{5.7}$$

де

$$\begin{aligned}\bar{\Omega}^x_{q1} &= -\Bigl[V_a\frac{\sigma_{q2}}{2} + V_a\frac{\sigma_{q4}}{2} + U_a\frac{\sigma_{q3}}{2} + \Phi_a\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} + \\ &+\varepsilon_4(2\delta_{a4}-2\delta_{14})\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} - \varepsilon_4\left(\frac{\delta_{a4}}{2}+\frac{\delta_{14}}{2}\right) + \frac{x_{q13}}{\beta}\Bigr], \\ \bar{\Omega}^x_{q2} &= -\Bigl[V_a\frac{\sigma_{q3}}{2} + V_a\frac{\sigma_{q1}}{2} + U_a\frac{\sigma_{q4}}{2} + \Phi_a\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} + \\ &+\varepsilon_4(2\delta_{a4}-2\delta_{14})\left(\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} - \frac{\sigma_{q3}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2}\right) - \frac{x_{q24}}{\beta}\Bigr], \\ \bar{\Omega}^x_{q3} &= -\Bigl[V_a\frac{\sigma_{q4}}{2} + V_a\frac{\sigma_{q2}}{2} + U_a\frac{\sigma_{q1}}{2} + \Phi_a\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} + \\ &+\varepsilon_4(2\delta_{a4}-2\delta_{14})\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q4}}{2} + \varepsilon_4\left(\frac{\delta_{a4}}{2}+\frac{\delta_{14}}{2}\right) - \frac{x_{q13}}{\beta}\Bigr], \\ \bar{\Omega}^x_{q4} &= -\Bigl[V_a\frac{\sigma_{q1}}{2} + V_a\frac{\sigma_{q3}}{2} + U_a\frac{\sigma_{q2}}{2} + \Phi_a\frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2} + \\ &+\varepsilon_4(2\delta_{a4}-2\delta_{14})\left(\frac{\sigma_{q2}}{2}\frac{\sigma_{q3}}{2} - \frac{\sigma_{q1}}{2}\frac{\sigma_{q2}}{2}\right) + \frac{x_{q24}}{\beta}\Bigr].\end{aligned} \tag{5.8}$$

В одночастинковому наближенні закон еволюції псевдоспінових операторів

$$\begin{aligned}\sigma^{\alpha}_{q13}(t) &= \sigma^{\alpha}_{q13}\exp\left[-i\alpha t\bar{\Omega}^x_{q13}\right], \\ \sigma^{\alpha}_{q24}(t) &= \sigma^{\alpha}_{q24}\exp\left[-i\alpha t\bar{\Omega}^x_{q24}\right],\end{aligned} \tag{5.9}$$

де $\bar{\Omega}^x_{q13} = \frac{\bar{x}_{q13}}{\beta}$, $\bar{\Omega}^x_{q24} = \frac{\bar{x}_{q24}}{\beta}$. Враховуючи, що псевдоспінові оператори σ_{qf} набувають значень ± 1, власні значення гамільтоніана (5.4) набувають такого вигляду:

$$\Omega^x_{q13\frac{1}{2}} = -\Omega^x_{q1\frac{1}{2}} = \Omega^x_{q3\frac{1}{2}} = \mp(\varepsilon' - w') - \delta_{14}\varepsilon_4 + x_{q13},$$

$$
\begin{aligned}
\Omega^x_{q13\frac{3}{4}} &= -\Omega^x_{q1\frac{3}{4}} = \Omega^x_{q3\frac{3}{4}} = \mp(w' - w'_1) - \delta_{14}\varepsilon_4 + x_{q13},\\
\Omega^x_{q13\frac{5}{6}} &= -\Omega^x_{q1\frac{5}{6}} = \Omega^x_{q3\frac{5}{6}} = \mp w' - \delta_{a4}\varepsilon_4 + x_{q13},\\
\Omega^x_{q24\frac{1}{2}} &= \Omega^x_{q2\frac{1}{2}} = -\Omega^x_{q4\frac{1}{2}} = \mp(\varepsilon' - w') + x_{q24},\\
\Omega^x_{q24\frac{3}{4}} &= \Omega^x_{q2\frac{3}{4}} = -\Omega^x_{q4\frac{3}{4}} = \mp(w' - w'_1) + x_{q24},\\
\Omega^x_{q24\frac{5}{6}} &= \Omega^x_{q2\frac{5}{6}} = -\Omega^x_{q4\frac{5}{6}} = \mp w' + (\delta_{a4} - \delta_{14})\varepsilon_4 + x_{q24},\\
\Omega^x_{q24\frac{7}{8}} &= \Omega^x_{q2\frac{7}{8}} = -\Omega^x_{q4\frac{7}{8}} = \mp w' - (\delta_{a4} - \delta_{14})\varepsilon_4 + x_{q24}.
\end{aligned}
\tag{5.10}
$$

Тоді вираз (5.7) можна записати у такому вигляді:

$$
\sigma^\alpha_{qf}(t) = \sum_{\mu=1}^{8} \sigma^\alpha_{qf}\big(\Omega^x_{qf\mu}\big)e^{-it\alpha\Omega^x_{qf\mu}} = \sigma^\alpha_{qf}\sum_{\mu=1}^{8} R_{qf}\big(\Omega^x_{qf\mu}\big)e^{-it\alpha\Omega^x_{qf\mu}},
\tag{5.11}
$$

де $R_{qf}\big(\Omega^x_{qf\mu}\big)$ збігається з $R_{qf}\big(\Omega^x_{qf}\big)$ (2.11).

Кінетичне рівняння (5.1) після розрахунків виразів (5.2) отримується у такому вигляді:

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle \prod_{f\{1\ldots4\}} \sigma_{qf}\rangle = -2\sum_{\mu=1}^{8}\Bigg[\langle \prod_{f\{1\ldots4\}} \sigma_{qf} \sum_{f\{1\ldots4\}} K_{f\mu}R_{qf}\big(\Omega^x_{qf\mu}\big) -\\
-\langle \prod_{f\{1\ldots4\}} \sigma_{qf} \sum_{f\{1\ldots4\}} K_{f\mu}Z_{qf\mu}\sigma_{qf}R_{qf}\big(\Omega^x_{qf\mu}\big)\rangle\Bigg],
\end{aligned}
\tag{5.12}
$$

де

$$
\begin{aligned}
Z_{q13\mu} &= -Z_{q1\mu} = Z_{q3\mu} = \mathrm{th}\frac{\beta}{2}\Omega^x_{q13\mu},\\
Z_{q24\mu} &= Z_{q2\mu} = -Z_{q4\mu} = \mathrm{th}\frac{\beta}{2}\Omega^x_{q24\mu},\\
k_{f\mu} &= \int_0^\infty dt e^{-\varepsilon t}\cos\big(\Omega^x_{qf\mu}t\big)\mathrm{Re}\big[\langle \bar{u}^-(t)\bar{u}^+\rangle_q + \langle \bar{u}^+(t)\bar{u}^-\rangle_q\big].
\end{aligned}
\tag{5.13}
$$

При прикладанні до кристалу $ND_4D_2PO_4$ електричного поля E_1 функції розподілу мають таку симетрію:

$$
\begin{aligned}
&\eta^{(1)x}_{q13} = -\langle\sigma_{q1}\rangle = \langle\sigma_{q3}\rangle, \quad \eta^{(1)x}_{q24} = \langle\sigma_{q2}\rangle = -\langle\sigma_{q4}\rangle,\\
&\eta^{(3)x}_{q13} = -\langle\sigma_{q2}\sigma_{q3}\sigma_{q4}\rangle = \langle\sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q4}\rangle,\\
&\eta^{(3)x}_{q24} = \langle\sigma_{q1}\sigma_{q3}\sigma_{q4}\rangle = -\langle\sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q3}\rangle,
\end{aligned}
\tag{5.14}
$$

$$
\begin{aligned}
&\eta^{(2)x}_{q1} = \langle\sigma_{q1}\sigma_{q4}\rangle = \langle\sigma_{q2}\sigma_{q3}\rangle, \quad \eta^{(2)x}_{q2} = -\langle\sigma_{q1}\sigma_{q2}\rangle = -\langle\sigma_{q3}\sigma_{q4}\rangle,\\
&\eta^{(2)x}_{q13} = -\langle\sigma_{q1}\sigma_{q3}\rangle, \quad \eta^{(2)x}_{q24} = -\langle\sigma_{q2}\sigma_{q4}\rangle.
\end{aligned}
$$

Тоді використовуючи рівняння (5.12) і враховуючи співвідношення (5.14), отримуємо систему рівнянь для залежних від часу функцій розподілу дейтронів $ND_4D_2PO_4$:

$$
\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}\eta^{(1)z}_{q13}\\ \eta^{(1)z}_{q24}\\ \eta^{(3)z}_{q13}\\ \eta^{(3)z}_{q24}\\ \eta^{(2)z}_{q1}\\ \eta^{(2)z}_{q2}\\ \eta^{(2)z}_{q13}\\ \eta^{(2)z}_{q24}\\ \eta^{(4)z}_{q}\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
\bar{a}_{q11} & \bar{a}_{q12} & \ldots & \bar{a}_{q19}\\
\bar{a}_{q21} & \bar{a}_{q22} & \ldots & \bar{a}_{q29}\\
\bar{a}_{q31} & \bar{a}_{q32} & \ldots & \bar{a}_{q39}\\
\bar{a}_{q41} & \bar{a}_{q42} & \ldots & \bar{a}_{q49}\\
\bar{a}_{q51} & \bar{a}_{q52} & \ldots & \bar{a}_{q59}\\
\bar{a}_{q61} & \bar{a}_{q62} & \ldots & \bar{a}_{q69}\\
\bar{a}_{q71} & \bar{a}_{q72} & \ldots & \bar{a}_{q79}\\
\bar{a}_{q81} & \bar{a}_{q82} & \ldots & \bar{a}_{q89}\\
\bar{a}_{q91} & \bar{a}_{q92} & \ldots & \bar{a}_{q99}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}\eta^{(1)z}_{q13}\\ \eta^{(1)z}_{q24}\\ \eta^{(3)z}_{q13}\\ \eta^{(3)z}_{q24}\\ \eta^{(2)z}_{q1}\\ \eta^{(2)z}_{q2}\\ \eta^{(2)z}_{q13}\\ \eta^{(2)z}_{q24}\\ \eta^{(4)z}_{q}\end{pmatrix}
+
\begin{pmatrix}\bar{a}_{q1}\\ \bar{a}_{q2}\\ \bar{a}_{q3}\\ \bar{a}_{q4}\\ \bar{a}_{q5}\\ \bar{a}_{q6}\\ \bar{a}_{q7}\\ \bar{a}_{q8}\\ \bar{a}_{q9}\end{pmatrix}.
\tag{5.15}
$$

Тут використані наступні позначення:

$$
\begin{aligned}
&\bar{a}_{q11} = -(l_{13} + P^x_{q13}), \quad \bar{a}_{q12} = 0,\\
&\bar{a}_{q13} = -n_{13} + R^x_{q13}, \quad \bar{a}_{q14} = -(m_{131} - m_{132}),\\
&\bar{a}_{q15} = -q_{131} + M^x_{q13}, \quad \bar{a}_{q16} = q_{132} - M^x_{q13},\\
&\bar{a}_{q17} = r_{13}, \quad \bar{a}_{q18} = -N^x_{q13},\\
&\bar{a}_{q19} = -p_{13}, \quad \bar{a}_{q1} = L^x_{q13},\\
&\bar{a}_{q21} = 0, \quad \bar{a}_{q22} = -(l_{24} + P^x_{q24}),\\
&\bar{a}_{q23} = -(m_{241} - m_{242}), \quad \bar{a}_{q24} = -n_{24} + R^x_{q24},\\
&\bar{a}_{q25} = -q_{241} + M^x_{q24}, \quad \bar{a}_{q26} = q_{242} - M^x_{q24},\\
&\bar{a}_{q27} = -N^x_{q24}, \quad \bar{a}_{q28} = r_{24},\\
&\bar{a}_{q29} = -p_{24}, \quad \bar{a}_{q2} = L^x_{q24},\\
&\bar{a}_{q31} = -n_{13} - 2P^x_{q24} + 2R^x_{q24} + R^x_{q13}, \quad \bar{a}_{q32} = 0,\\
&\bar{a}_{q33} = -(l_{13} + 2l_{24}) + P^x_{q13}),\\
&\bar{a}_{q34} = -(m_{131} - m_{132}) + (m_{242} - m_{241}),\\
&\bar{a}_{q35} = -(q_{131} + r_{24}) + p_{24}) - M^x_{q13} - N^x_{q24} + L^x_{q24},\\
&\bar{a}_{q36} = q_{132} + r_{24} + p_{24} + M^x_{q131} - N^x_{q24} + L^x_{q24},\\
&\bar{a}_{q37} = -p_{13}, \quad \bar{a}_{q38} = q_{242} + q_{241} + L^x_{q13},\\
&\bar{a}_{q39} = -(q_{241} + q_{242} - r_{13}), \quad \bar{a}_{q3} = -N^x_{q13},
\end{aligned}
$$

$$\bar{a}_{q41} = m_{131}, \quad \bar{a}_{q42} = -m_{131} - n_{24} - 2P^x_{q13} + 2R^x_{q13} + R^x_{q24},$$
$$\bar{a}_{q43} = -(m_{131} - m_{132}) - (m_{241} - m_{242}),$$
$$\bar{a}_{q44} = -(2l_{13} + l_{24}) - P^x_{q24}),$$
$$\bar{a}_{q45} = -(q_{242} + r_{13}) + p_{13}) - N^x_{q13} + L^x_{q13} + M^x_{q241},$$
$$\bar{a}_{q46} = q_{241} + r_{13} - p_{13} - N^x_{q13} + L^x_{q13} - M^x_{q242},$$
$$\bar{a}_{q47} = q_{131} + q_{132} + L^x_{q24}, \quad \bar{a}_{q48} = -p_{24},$$
$$\bar{a}_{q49} = -(q_{131} + q_{132} + r_{24}), \quad \bar{a}_{q4} = -N^x_{q24},$$
$$\bar{a}_{q51} = q_{132} - q_{241} - M^x_{q13} - N^x_{q24} + L^x_{q24},$$
$$\bar{a}_{q52} = -N^x_{q13} + L^x_{q13} - M^x_{q24},$$
$$\bar{a}_{q53} = -q_{131} - r_{24} - p_{24} + M^x_{q132},$$
$$\bar{a}_{q54} = -q_{242} - r_{13} - p_{13} + M^x_{q241},$$
$$\bar{a}_{q55} = -(l_{13} + l_{24}) + R^x_{q13} + R^x_{q24},$$
$$\bar{a}_{q56} = -n_{13} - n_{24} - P^x_{q13} - P^x_{q24},$$
$$\bar{a}_{q57} = m_{131} - Q^x_{q24}, \quad \bar{a}_{q58} = m_{242} - Q^x_{q13},$$
$$\bar{a}_{q59} = -(m_{132} + m_{241}), \quad \bar{a}_{q5} = Q^x_{q13} + Q^x_{q24},$$
$$\bar{a}_{q61} = q_{131} + M^x_{q131} - N^x_{q24} + L^x_{q24},$$
$$\bar{a}_{q62} = -q_{242} - N^x_{q13} + L^x_{q13} + M^x_{q242},$$
$$\bar{a}_{q63} = -q_{132} - r_{24} + p_{24} - M^x_{q13}, \; \bar{a}_{q64} = q_{241} - r_{13} + p_{13} - M^x_{q24},$$
$$\bar{a}_{q65} = n_{13} + n_{24} + P^x_{q13} + P^x_{q24}, \; \bar{a}_{q66} = -(l_{13} + l_{24}) + R^x_{q13} + R^x_{q24},$$
$$\bar{a}_{q67} = m_{132} + Q^x_{q24}, \quad \bar{a}_{q68} = m_{241} + Q^x_{q13},$$
$$\bar{a}_{q69} = -(m_{131} + m_{132}), \quad \bar{a}_{q6} = -(Q^x_{q13} + Q^x_{q24}),$$
$$\bar{a}_{q71} = 2L^x_{q13}, \quad \bar{a}_{q72} = 0,$$
$$\bar{a}_{q73} = -2N^x_{q13}, \quad \bar{a}_{q74} = 0,$$
$$\bar{a}_{q75} = -(m_{131} + m_{132}) - 2Q^x_{q13}, \; \bar{a}_{q76} = m_{132} + m_{131} + 2Q^x_{q13},$$
$$\bar{a}_{q77} = -2l_{13}, \quad \bar{a}_{q78} = 2R^x_{q13},$$
$$\bar{a}_{q79} = 0, \quad \bar{a}_{q7} = -2P^x_{q13},$$
$$\bar{a}_{q81} = 0, \quad \bar{a}_{q82} = 2L^x_{q24},$$
$$\bar{a}_{q83} = 0, \quad \bar{a}_{q84} = -2N^x_{q24},$$
$$\bar{a}_{q85} = -(m_{241} + m_{242}) - 2Q^x_{q24}, \; \bar{a}_{q86} = m_{241} + m_{242} + 2Q^x_{q24},$$
$$\bar{a}_{q87} = 2R^x_{q24}, \quad \bar{a}_{q88} = -2l_{24},$$
$$\bar{a}_{q89} = 0, \quad \bar{a}_{q8} = -2P^x_{q24},$$
$$\bar{a}_{q91} = -2N^x_{q13}, \quad \bar{a}_{q92} = 2N^x_{q24},$$
$$\bar{a}_{q93} = 0, \quad \bar{a}_{q94} = 2R^x_{q24},$$

$$\bar{a}_{q95} = -2(m_{132} + m_{241}) + Q^x_{q131} + Q^x_{q132} + Q^x_{q241} + Q^x_{q242},$$
$$\bar{a}_{q96} = -2(m_{131} - m_{242}) - (Q^x_{q131} + Q^x_{q132} + Q^x_{q241} + Q^x_{q242}),$$
$$\bar{a}_{q97} = 2R^x_{q24}, \quad \bar{a}_{q98} = 2R^x_{q13},$$
$$\bar{a}_{q99} = -2(l_{13} + l_{24}), \quad \bar{a}_{q9} = 2(P^x_{q13} + P^x_{q24}),$$

де

$$p_{13} = \frac{1}{4}(K_{131} - K_{132} + K_{133} - K_{134} + 2K_{135} - 2K_{136}),$$
$$q_{13} = \frac{1}{4}(K_{131} - K_{132} - K_{133} + K_{134}),$$
$$r_{13} = \frac{1}{4}(K_{131} - K_{132} - K_{133} - K_{134} - 2K_{135} + 2K_{136}),$$
$$n_{13} = \frac{1}{4}(K_{131} + K_{132} + K_{133} + K_{134} - 2K_{135} - 2K_{136}),$$
$$m_{13} = \frac{1}{4}(K_{131} + K_{132} - K_{133} - K_{134}),$$
$$l_{13} = \frac{1}{4}(K_{131} + K_{132} + K_{133} + K_{134} + 2K_{135} + K_{136}),$$
$$p_{24} = \frac{1}{4}(K_{241} - K_{242} + K_{243} - K_{244} + K_{245} - K_{246} + K_{247} - K_{248}),$$
$$q_{124} = \frac{1}{4}(K_{241} - K_{242} - K_{243} + K_{244} + K_{245} + K_{246} - K_{247} - K_{248}),$$
$$q_{224} = \frac{1}{4}(K_{241} - K_{242} - K_{243} + K_{244} - K_{245} - K_{246} + K_{247} + K_{248}),$$
$$r_{24} = \frac{1}{4}(K_{241} - K_{242} + K_{243} - K_{244} - K_{245} + K_{246} - K_{247} + K_{248}),$$
$$n_{24} = \frac{1}{4}(K_{241} + K_{242} + K_{243} + K_{244} - K_{245} - K_{246} - K_{247} - K_{248}),$$
$$m_{124} = \frac{1}{4}(K_{241} + K_{242} - K_{243} - K_{244} + K_{245} - K_{246} - K_{247} + K_{248}),$$
$$m_{224} = \frac{1}{4}(K_{241} + K_{242} - K_{243} - K_{244} - K_{245} + K_{246} + K_{247} - K_{248}),$$
$$l_{24} = \frac{1}{4}(K_{241} + K_{242} + K_{243} + K_{244} + K_{245} + K_{246} + K_{247} + K_{248}),$$
$$P^x_{q13} = \frac{1}{4}(K_{131}Z_{q131} - K_{132}Z_{q132} + K_{133}Z_{q133} - K_{134}Z_{q134} +$$
$$+2K_{135}Z_{q135} - 2K_{136}Z_{q136}),$$
$$Q^x_{q13} = \frac{1}{4}(K_{131}Z_{q131} - K_{132}Z_{q132} - K_{133}Z_{q133} + K_{134}Z_{q134}),$$
$$R^x_{q13} = \frac{1}{4}(K_{131}Z_{q131} - K_{132}Z_{q132} + K_{133}Z_{q133} - K_{134}Z_{q134} -$$

$$-2K_{135}Z_{q135}+2K_{136}Z_{q136}),$$
$$N^x_{q13}=\frac{1}{4}(K_{131}Z_{q131}+K_{132}Z_{q132}+K_{133}Z_{q133}+K_{134}Z_{q134}-$$
$$-2K_{135}Z_{q135}-2K_{136}Z_{q136}),$$
$$M^x_{q13}=\frac{1}{4}(K_{131}Z_{q131}+K_{132}Z_{q132}-K_{133}Z_{q133}-K_{134}Z_{q134}),$$
$$L^x_{q13}=\frac{1}{4}(K_{131}Z_{q131}+K_{132}Z_{q132}+K_{133}Z_{q133}+K_{134}Z_{q134}+$$
$$+2K_{135}Z_{q135}+2K_{136}Z_{q136}),$$
$$P^x_{q24}=\frac{1}{4}(K_{241}Z_{q241}-K_{242}Z_{q242}+K_{243}Z_{q243}-K_{244}Z_{q244}+$$
$$+K_{245}Z_{q245}-K_{246}Z_{q246}+K_{247}Z_{q247}-K_{248}Z_{q248}),$$
$$Q^x_{q124}=\frac{1}{4}(K_{241}Z_{q241}-K_{242}Z_{q242}-K_{243}Z_{q243}+K_{244}Z_{q244}+$$
$$+K_{245}Z_{q245}+K_{246}Z_{q246}-K_{247}Z_{q247}-K_{248}Z_{q248}),$$
$$Q^x_{q224}=\frac{1}{4}(K_{241}Z_{q241}-K_{242}Z_{q242}-K_{243}Z_{q243}+K_{244}Z_{q244}-$$
$$-K_{245}Z_{q245}-K_{246}Z_{q246}+K_{247}Z_{q247}+K_{248}Z_{q248}),$$
$$R^x_{q24}=\frac{1}{4}(K_{241}Z_{q241}-K_{242}Z_{q242}+K_{243}Z_{q243}-K_{244}Z_{q244}-$$
$$-K_{245}Z_{q245}+K_{246}Z_{q246}-K_{247}Z_{q247}+K_{248}Z_{q248}),$$
$$N^x_{q24}=\frac{1}{4}(K_{241}Z_{q241}+K_{242}Z_{q242}+K_{243}Z_{q243}+K_{244}Z_{q244}-$$
$$-K_{245}Z_{q245}-K_{246}Z_{q246}-K_{247}Z_{q247}-K_{248}Z_{q248}),$$
$$M^x_{q124}=\frac{1}{4}(K_{241}Z_{q241}+K_{242}Z_{q242}-K_{243}Z_{q243}-K_{244}Z_{q244}+$$
$$+K_{245}Z_{q245}-K_{246}Z_{q246}-K_{247}Z_{q247}+K_{248}Z_{q248}),$$
$$M^x_{q224}=\frac{1}{4}(K_{241}Z_{q241}+K_{242}Z_{q242}-K_{243}Z_{q243}-K_{244}Z_{q244}-$$
$$-K_{245}Z_{q245}+K_{246}Z_{q246}+K_{247}Z_{q247}-K_{248}Z_{q248}),$$
$$L^x_{q24}=\frac{1}{4}(K_{241}Z_{q241}+K_{242}Z_{q242}+K_{243}Z_{q243}+K_{244}Z_{q244}+$$
$$+K_{245}Z_{q245}+K_{246}Z_{q246}+K_{247}Z_{q247}+K_{248}Z_{q248}).$$

В одночастинковому наближенні

$$\frac{d}{dt}\eta^{(1)x}_{q13}=-2\bar{K}_{13}\eta^{(1)x}_{q13}+2\bar{K}_{13}\mathrm{th}\frac{\bar{\Omega}^x_{q13}}{2},$$
$$\frac{d}{dt}\eta^{(1)x}_{q24}=-2\bar{K}_{24}\eta^{(1)}_{q24}+2\bar{K}_{24}\mathrm{th}\frac{\bar{\Omega}^x_{q24}}{2}. \qquad (5.16)$$

У випадку $K_{f\mu}=K=\frac{1}{\alpha}$ система рівнянь (5.15) переходить у систему рівнянь, яка отримана в рамках стохастичної моделі Глаубера в роботі [48].

6. Висновки

На основі кінетичного рівняння, отриманого в рамках методу нерівноважного статистичного оператора в наближенні чотиричастинкового кластера знайдено системи рівнянь для залежних від часу функцій розподілу дейтронів для сегнетоелектриків типу KD_2PO_4 та антисегнетоелектриків типу $ND_4D_2PO_4$ при врахуванні п'єзоелектричного зв'язку та взаємодії дейтронів із зовнішніми електричними полями E_3 і E_1. Встановлено, що у випадку, коли кінетичні параметри не залежать від частоти, отримані тут системи кінетичних рівнянь збігаються з отриманими нами раніше в рамках моделі Глаубера.

Література

1. Левицкий Р.Р., Зачек И.Р., Волков А.А., Козлов Г.В., Лебедев СП. Теоретическое и экспериментальное исследование релаксационных явлений в KD_2PO_4. - Киев, 1980. - 39 с. - (Препр. / АН УССР. Ин-т теор. физ.; ИТФ-80-13Р).
2. Yoshimitsu K., Matsubara T. Relaxation Process in Ferroelectrics near the Curie Temperature // Suppl. Progr. Theor. Phys., Extra Number. - 1968. - P. 109-136.
3. Левицкий Р.Р., Зачек И.Р. Релаксационные процессы в сегнетоактивных соединениях с водородными связями типа ортофосфатов. I. - Киев, 1977. - 38 с. - (Препр. / АН УССР. Ин-т теор. физ.; ИТФ-77-29Р).
4. Поплавко Ю.М. Физика диэлектриков. - Киев: Высшая школа, 1980. - 398 с.
5. Блинц Р., Жекш Б. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. Динамика решетки. - М.: Мир, 1975. - 398 с.
6. Havlin S., Litov E., Sompolinsky H. The transverse dielectric properties of KH_2PO_4 // Phys. Lett. -1975. - Vol. 51A, №1. - P. 33-35.
7. Havlin S., Litov E., Sompolinsky H. Anomalous temperature dependence of protonic E-mode in KDP-type crystals // Phys. Lett. - 1975. - Vol. 53A, №1. - P. 41-42.
8. Takagi V., Shigenari T. Transverse susceptibility and E-mode raman

spectra of KH_2PO_4 crystals // J. Phys. Soc. Japan. - 1975 - Vol. 39, №2. - P. 440-447.
9. Havlin S., Sompolinsky H. Central E-mode and transverse dynamical properties of KDP-type crystals // Phys. Lett. - 1976. - Vol. 51A, №2. - P. 171-172.
10. Левицкий Р.Р., Зачек И.Р. Релаксационные явления в ортофосфатах. Метод уравнений Блоха. - Киев, 1980. - 33 с. - (Препр. / АН УССР. Ин-т теор. физ.; ИТФ-80-106Р).
11. Левицкий Р.Р., Зачек И.Р. К теории релаксационных явлений в ортофосфатах. Метод уравнений Блоха. - Киев, 1982. - 42 с. - (Препр. / АН УССР. Ин-т теор. физ.; ИТФ-82-8Р).
12. Левицький Р.Р., Зачек І.Р., Вдович А.С. Діелектричні, п'єзоелектричні та пружні властивості сегнетоелектриків KH_2PO_4 і RbH_2PO_4. Метод рівнянь Блоха // Препринт ICMP-10-18U, Львів, 2010, 59 с.
13. Glauber J. Time-dependent statistics of the Ising model // J. Math. Phys. - 1963. - Vol. 4, №2. - P. 294-307.
14. Левицкий Р.Р., Зачек И.Р. Релаксационные процессы в сегнетоактивных соединениях с водородными связями типа ортофосфатов. П. - Киев, 1977. - 38 с. -(Препр. / АН УССР, Ин-т теор.физ.; ИТФ-77-30Р).
15. Levitsky R.R., Zachek I.R., Varanitsky V.I. Relaxation dynamics of dueterated ferroelectric compounds with hydrogen bonds of orthophosphate type. - Kiev, 1979. - P.45. - (Prepr. / Acad. Sci. Ukr. SSR. Inst. Theor. Phys.; ITP-79-11E).
16. Зачек И.Р., Левицкий Р.Р. Релаксационная динамика дейтерированных сегнетоэлектрических ортофосфатов // Теорет. и мат. физика. - 1960. - Т. 43, №1. - С. 128-137.
17. Левицкий Р.Р., Зачек И.Р., Вараницкий В.И. Релаксационные процессы в сегнетоэлектриках с водородными связями типа KD_2PO_4 /Укр. физ. журн. - 1980. - Т.25, №12. - С. 1961-1969.
18. Левицький Р.Р., Зачек І.Р., Миц Є.В., Моїна А.П. Релаксаційні явища і термодинамічні властивості антисегнетоелектриків з водневими зв'язками типу ортофосфатів // Фізичний збірник. Львів: НТШ, 1998. - 3. - С. 417-446.
19. Боголюбов Н.Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. - М.: Гостехиздат, 1946. - С.
20. Helms S.P. Master equation for Ising model // Phys. Rev. - 1965. - V. 138, №2A. - P. 587-590.
21. Wangsness R.K., Bloch P. The dynamical theory of nuclear in- duction // Phys.Rev.- 1953 - V.89, №4. - P. 728-739.

22. Провоторов Б.Н. Квантовостатистическая теория перекрестной релаксации // Журн. экспер. и теор. физики. - 1962. - Т.42, № 3. - С. 882-888.
23. Пелетминский СВ., Яценко А.А. К квантовой теории кинетичес ких и релаксационных процессов // Журн. экспер. и теор. фи зики. - 1967. - Т.53, № 10. - С. 1327-1339.
24. Ахиезер А.И., Пелетминский СВ. Методы статистической, физики. - М.: Наука, 1971. - 361 с.
25. Петров Э.Г. Кинетические уравнения для квантовых подсистем с конечным числом степеней свободы в конденсированной среде // Теорет. и мат. физика. - 1981. -Т.46, №1. - С. 99-110.
26. Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. - М.: Наука, 1971. - 416 с.
27. Покровский Л.А. Получение обобщенных кинетических уравнений с помощью неравновесного статистического оператора // ДАН СССР. - 1968. - Т.183, № 4. - С. 806-809.
28. Покровский Л.А. Метод неравновесного статистического оператора и обобщенные кинетические уравнения. - Киев, 1968.- 29 с- (Препринт/АН УССР. Ин-т теор. физ.; ИТФ-68-78).
29. Зубарев Д.Н. Современные методы статистической теории неравновесных процессов // В кн. Итоги науки и техники. Современые проблемы математики. - М.:Винити, 1980. - т.15. - СЛЗІ-226,
30. Berim G.O., Kessel A.R. Kinetics of the Ising magnet. I.General theory // Physica. -1980.-V.101A, №1. - P. 112-126.
31. Berim G.O., Kessel A.R. Kinetics of the Ising magnet. II. Oneditnensional model // Physica. - 1980. - V. 101 A, № 1, 127-144.
32. Кессель А.Р., Верим Г.0. Магнитный резонанс изинговских магнетиков. - М.: Наука, 1982. - 147 с.
33. Левицкий Р.Р., Зачек И.Р., Токарчук М.В. К теории релаксационных явлений в квазиодномерных сегнетоэлектриках типа порядок-беспорядок. Метод неравновесного статистического оператора. - Львов, 1991. - 40 с. (Препринт/ИФКС НАН Украины; ИФКС-91-65Р).
34. Стасюк И.В., Билецкий И.Н., Стягар О.Н. Индуцированные внешним давлением фазовые переходы в кристаллах KD_2PO_4. // УФЖ, 1986, т. 31, № 4, с. 567–571.
35. Stasyuk I.V., Levitskii R.R., Zachek I.R., Moina A.P. The KD_2PO_4 ferroelectrics in external fields conjugate to the order parameter: Shear stress σ_6. // Phys. Rev. B, 2000, v. 62, №. 10, p. 6198–6207.
36. Levitskii R.R., Lisnii B.M. Theory of related to shear strain u_6 phys-

ical properties of ferroelectrics and antiferroelectrics of the KH_2PO_4 family // phys. stat. sol. (b). - 2004. -Vol.241, №6.-P.1350-1368.

37. Левицький Р.Р., Лісний Б.М., Теорія п'єзоелектричних, пружних та діелектричних властивостей кристалів сім'ї KH_2PO_4 при деформації u_6. Фазовий перехід та п'єзоефект у кристалі KH_2PO_4 // Журн. фіз. досліджень, 2003, т. 7, №4, с. 431-445.
38. Левицький Р.Р., Зачек І.Р., Вдович А.С. Повздовжні діелектричні, п'єзоелектричні, пружні, динамічні та теплові властивості сегнетоелектриків типу KH_2PO_4 // Препринт ICMP-06-08U, Львів, 2006, 116 с.
39. Левицький Р.Р., Зачек І.Р., Вдович А.С. Поперечні діелектричні, п'єзоелектричні, пружні та динамічні властивості сегнетоелектриків типу KH_2PO_4. - Львів, 2007. - 80 с. (Препр. / НАН України. Ін-т фіз. конденс. систем; ICMP-07-24U).
40. Levitsky R.R., Zachek I.R., Moina A.P., Vdovych A.S. Longitudinal relaxation of mechanically free KH_2PO_4 type crystals. Piezoelectric resonance and sound attenuation // Condens. Matter Phys. - 2008. - Vol. 11, No 3(55). - P. 555-570.
41. Левицький Р.Р., Зачек І.Р., Вдович А.С. Поперечна релаксація в сегнетоелектриках з водневими зв'язками сім'ї KH_2PO_4 // Фізика і хімія твердого тіла. - 2009. - Т. 10, № 2. - С. 377-388.
42. Стасюк І.В., Левицький Р.Р., Моїна А.П., Сливка О.Г., Величко О.В. Польові та деформаційні ефекти у складних сегнетоактивних сполуках. – Ужгород: Гражда, 2009. – 392с.
43. Levitsky R.R., Zachek I.R., Vdovych A.S., Moina A.P. Longitudinal dielectric, piezoelectric, elastic, and thermal characteristics of the KH_2PO_4 type ferroelectrics // J. Phys. Study. - 2010. - Vol. 14, No 1. - P. 1701(17p.)
44. Левицький Р.Р., Зачек І.Р., Вдович А.С. Статичні діелектричні, п'єзоелектричні і пружні властивості антисегнетоелектриків $NH_4H_2PO_4$ і $ND_4D_2PO_4$ // Фізика і хімія твердого тіла. - 2009. - Т. 13, № 2. - С. 635-646.
45. Levitsky R.R., Zachek I.R., Moina A.P., Vdovych A.S. Longitudinal relaxation of $ND_4D_2PO_4$ type antiferroelectrics. Piezoelectric resonance and sound attenuation // Condens. Matter Phys. - 2009. - Vol. 12, No 2. - P. 275-294.
46. Левицький Р.Р., Зачек І.Р., Вдович А.С. Діелектричні, п'єзоелектричні і пружні властивості простої моделі п'єзоелектрика // Вісник НУЛП, фіз. мат. науки. - 2009. - вип.660, N 660. - С. 80 - 95.
47. Левицький Р.Р., Зачек І.Р., Вдович А.С. Поздовжні статичні діелектричні, п'єзоелектричні, пружні, електрострикційні та динамічні діелектричні властивості антисегнетоелектриків типу $ND_4D_2PO_4$. - Львів, 2008. - 61 с. (Препр. / НАН України. Ін-т фіз. конденс. систем; ICMP-08-19U)..
48. Левицький Р.Р., Зачек І.Р., Вдович А.С. Поперечні статичні діелектричні, п'єзоелектричні, пружні, електрострикційні та динамічні діелектричні властивості антисегнетоелектриків типу $ND_4D_2PO_4$. - Львів, 2008. - 46 с. (Препр. / НАН України. Ін-т фіз. конденс. систем; ICMP-08-20U).

CONDENSED MATTER PHYSICS

The journal **Condensed Matter Physics** is founded in 1993 and published by Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine.

AIMS AND SCOPE: The journal **Condensed Matter Physics** contains research and review articles in the field of statistical mechanics and condensed matter theory. The main attention is paid to physics of solid, liquid and amorphous systems, phase equilibria and phase transitions, thermal, structural, electric, magnetic and optical properties of condensed matter. Condensed Matter Physics is published quarterly.

ABSTRACTED/INDEXED IN:

- Chemical Abstract Service, Current Contents/Physical, Chemical&Earth Sciences
- ISI Science Citation Index-Expanded, ISI Alrting Services
- INSPEC
- Elsevier Bibliographic Databases (EMBASE, EMNursing, Compendex, GEOBASE, Scopus)
- “Referativnyi Zhurnal”
- “Dzherelo”

CONTACT INFORMATION:
Institute for Condensed Matter Physics
of the National Academy of Sciences of Ukraine
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine
Tel: +38(032)2760908; Fax: +38(032)2761978
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua   http://www.icmp.lviv.ua