

ĐẠI HỌC QUỐC GIA HÀ NỘI
TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC TỰ NHIÊN

Cao Huy Phương

NGHIÊN CỨU TÍNH CHẤT NHIỆT ĐỘNG
CỦA VẬT LIỆU CẤU TRÚC PEROVSKITE
BẰNG PHƯƠNG PHÁP THỐNG KÊ MÔ MEN

LUẬN ÁN TIẾN SĨ VẬT LÝ HỌC

Hà Nội – 2023

ĐẠI HỌC QUỐC GIA HÀ NỘI
TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC TỰ NHIÊN

Cao Huy Phương

NGHIÊN CỨU TÍNH CHẤT NHIỆT ĐỘNG
CỦA VẬT LIỆU CẤU TRÚC PEROVSKITE
BẰNG PHƯƠNG PHÁP THỐNG KÊ MÔ MEN

Chuyên ngành: Vật lý lý thuyết và vật lý toán

Mã số: 9440130.01

LUẬN ÁN TIẾN SĨ VẬT LÝ HỌC

NGƯỜI HƯỚNG DẪN KHOA HỌC:

GS.TS.Vũ Văn Hùng

Hà Nội – 2023

LỜI CAM ĐOAN

Tôi xin cam đoan luận án này là công trình nghiên cứu của tôi dưới sự hướng dẫn trực tiếp của GS.TS. Vũ Văn Hùng. Các kết quả nghiên cứu của luận án là trung thực và chưa từng được công bố trên bất kì công trình nào trước đây.

Hà Nội, ngày tháng năm 2023

Tác giả luận án

Cao Huy Phương

LỜI CẢM ƠN

Trước tiên, em xin bày tỏ lòng biết ơn sâu sắc và lời cảm ơn chân thành đến thầy hướng dẫn GS. TS Vũ Văn Hùng. Sự hướng dẫn tận tụy và những động viên khích lệ của thầy là nguồn động lực to lớn cho em trong suốt quá trình hoàn thành chương trình đào tạo và làm luận án. Thầy mãi là tấm gương sáng về đạo đức, về tinh thần làm việc say mê và nghiêm túc để em học tập và noi theo.

Em xin trân trọng cảm ơn các thầy, cô giáo thuộc Bộ môn Vật lý lý thuyết, Khoa Vật lý, Phòng Đào tạo và Phòng Chính trị và Công tác sinh viên Trường Đại học Khoa học tự nhiên – Đại học Quốc gia Hà Nội đã tạo mọi điều kiện thuận lợi trong quá trình học tập để em hoàn thành chương trình đào tạo và luận án.

Tác giả xin trân trọng cảm ơn Ban Giám hiệu, Ban Lãnh đạo Khoa Khoa học Tự nhiên, các thầy cô Bộ môn Vật lý và các đồng nghiệp tại Trường Đại học Hùng Vương đã tạo mọi điều kiện thuận lợi về thời gian và hỗ trợ kinh phí để tác giả hoàn thành chương trình đào tạo và luận án.

Con xin bày tỏ lòng biết ơn vô hạn đối với cha, mẹ và các anh, chị, em trong gia đình đã cho con nghị lực vượt qua mọi khó khăn và trở ngại. Xin gửi lời cảm ơn sâu sắc đến người bạn đời và các con trai. Gia đình luôn là nguồn động lực to lớn cho tác giả trên con đường nghiên cứu khoa học đầy gian nan và thử thách.

Hà Nội, ngày tháng năm 2023
Tác giả luận án

Cao Huy Phương

MỤC LỤC

LỜI CAM ĐOAN	i
LỜI CẢM ƠN	ii
DANH MỤC CÁC KÍ HIỆU VÀ CHỮ VIẾT TẮT.....	4
DANH MỤC CÁC BẢNG.....	5
DANH MỤC CÁC HÌNH VẼ, ĐỒ THỊ.....	6
PHẦN MỞ ĐẦU	9
CHƯƠNG 1. TỔNG QUAN VỀ VẬT LIỆU CẤU TRÚC PEROVSKITE VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU.....	17
1.1. Vật liệu cấu trúc perovskite và một số ứng dụng.....	17
1.1.1. Cấu trúc tinh thể của vật liệu cấu trúc perovskite.....	17
1.1.2. Một số ứng dụng của vật liệu cấu trúc perovskite	24
1.2. Tổng quan một số phương pháp nghiên cứu.....	27
1.2.1. Tổng quan về phương pháp động lực học phân tử.....	27
1.2.2. Tổng quan về phương pháp ab initio	35
1.3. Tổng quan về phương pháp thống kê mô men.....	38
1.3.1. Công thức tổng quát về mô men	38
1.3.2. Tổng quan kết quả nghiên cứu tính chất nhiệt động của vật liệu bằng phương pháp thống kê mô men.....	44
Kết luận chương 1	46
CHƯƠNG 2. NGHIÊN CỨU TÍNH CHẤT NHIỆT ĐỘNG CỦA VẬT LIỆU CẤU TRÚC PEROVSKITE Ở ÁP SUẤT $P = 0$ GPa BẰNG PHƯƠNG PHÁP THỐNG KÊ MÔ MEN	47

2.1. Độ dời của nguyên tử khối nút mạng.....	47
2.2. Năng lượng tự do	54
2.3. Các đại lượng nhiệt động	59
2.3.1. Hệ số nở dài.....	59
2.3.2. Năng lượng và nhiệt dung đẳng tích	60
2.3.3. Hệ số nén đẳng nhiệt và nhiệt dung đẳng áp	62
2.4. Kết quả tính số cho một số vật liệu cấu trúc perovskite	62
2.4.1. Thế năng tương tác.....	62
2.4.2. Xác định các thông số	68
2.4.3. Tính chất nhiệt động của SrTiO ₃ ở áp suất P = 0 GPa.....	69
2.4.4. Tính chất nhiệt động của BaTiO ₃ ở áp suất P = 0 GPa.....	76
Kết luận chương 2	82
CHƯƠNG 3. NGHIÊN CỨU ẢNH HƯỞNG CỦA ÁP SUẤT LÊN TÍNH CHẤT NHIỆT ĐỘNG CỦA VẬT LIỆU CẤU TRÚC PEROVSKITE BẰNG PHƯƠNG PHÁP THỐNG KÊ MÔ MEN.....	83
3.1. Phương trình trạng thái	83
3.2. Các đại lượng nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite ở áp suất khác nhau	84
3.3. Kết quả tính số cho một số vật liệu cấu trúc perovskite	87
3.3.1. Ảnh hưởng của áp suất lên tính chất nhiệt động của SrTiO ₃	87
3.3.2. Ảnh hưởng của áp suất lên tính chất nhiệt động của BaTiO ₃	94
Kết luận chương 3	100
KẾT LUẬN	101

DANH MỤC CÔNG TRÌNH KHOA HỌC CỦA TÁC GIẢ LIÊN QUAN ĐẾN	
LUẬN ÁN	103
TÀI LIỆU THAM KHẢO.....	104
PHỤ LỤC.....	122

DANH MỤC CÁC KÍ HIỆU VÀ CHỮ VIẾT TẮT

Kí hiệu	Diễn giải
PPTKMM	Phương pháp thống kê mô men
TKMM	Thống kê mô men
LT	Lí thuyết
TN	Thực nghiệm

DANH MỤC CÁC BẢNG

Bảng 2.1. Tham số thể cho SrTiO ₃	65
Bảng 2.2. Tham số thể cho BaTiO ₃	65
Bảng 2.3. Các tham số u_{bq} và $z_{bq}^A, z_{bq}^B, z_{bq}^X$ của cấu trúc tinh thể perovskite ABX ₃	67
Bảng 2.4. Hằng số mạng của SrTiO ₃ ở nhiệt độ phòng và áp suất $P = 0$ GPa.	70
Bảng 2.5. Hằng số mạng của BaTiO ₃ ở 120 °C và áp suất $P = 0$ GPa.....	77
Bảng 3.1. Hằng số mạng của SrTiO ₃ cấu trúc lập phương ở áp suất $P = 1atm$ và nhiệt độ phòng.....	88
Bảng 3.2. Hệ số góc của đường cong nhiệt dung đẳng tích C_V và đẳng áp C_P của SrTiO ₃ ở nhiệt độ 298 K, 381 K và 464 K.	93
Bảng 3.3. Hệ số góc của đường cong nhiệt dung đẳng tích C_V và đẳng áp C_P của BaTiO ₃ ở nhiệt độ 400 K, 500 K và 600 K.	99

DANH MỤC CÁC HÌNH VẼ, ĐỒ THỊ

Hình 1.1. Ô cơ sở của tinh thể perovskite cấu trúc lập phương.....	18
Hình 1.2. Các phần tử trong bảng tuần hoàn các nguyên tố hóa học có thể chiếm đóng 3 vị trí A, B và X trong cấu trúc tinh thể vật liệu perovskite.....	18
Hình 1.3. Cấu trúc perovskite ABO_3	20
Hình 1.4. Một số dạng cấu trúc tinh thể của vật liệu cấu trúc perovskite.....	21
Hình 1.5. Ô cơ sở của $SrTiO_3$	23
Hình 1.6. Sự sắp xếp các mặt phẳng nguyên tử trong tinh thể $SrTiO_3$	23
Hình 1.7. Sự thay đổi thể tích của $SrTiO_3$ với nhiệt độ từ kết quả tính toán động lực học phân tử và thực nghiệm	31
Hình 1.8. Sự thay đổi thể tích của $SrTiO_3$ với áp suất từ kết quả tính toán động lực học phân tử và thực nghiệm	31
Hình 1.9. Sự phụ thuộc nhiệt độ của hệ số nở dài của $SrTiO_3$ từ kết quả tính toán động lực học phân tử.....	32
Hình 1.10. Sự phụ thuộc nhiệt độ của nhiệt dung đẳng áp của $SrTiO_3$ từ kết quả tính toán động lực học phân tử và kết quả thực nghiệm của de Ligny, Coughlin	32
Hình 1.11. Hệ số nén đẳng nhiệt của $SrTiO_3$ ở các nhiệt độ khác nhau thu được từ tính toán động lực học phân tử và thực nghiệm.	33

Hình 1.12. Hệ số nở dài của SrTiO ₃ ở nhiệt độ khác nhau thu được từ kết quả tính toán động lực học phân tử và một số kết quả thực nghiệm.	34
Hình 1.13. Nhiệt dung đẳng áp của SrTiO ₃ là hàm số của nhiệt độ thu được từ tính toán động lực học phân tử và kết quả thực nghiệm và kết quả tính toán Seetawan.....	34
Hình 1.14. Kết quả tính toán của A.Boudali về sự phụ thuộc nhiệt độ của hệ số dẫn nở vì nhiệt của SrTiO ₃ ở các áp suất 0, 4, 8, 12, 16 và 20 GPa.	37
Hình 1.15. Kết quả tính toán của A.Boudali về sự phụ thuộc nhiệt độ của nhiệt dung của SrTiO ₃ ở các áp suất 0, 4, 8, 12, 16 và 20 GPa.	37
Hình 2.1. Ô cơ sở của tinh thể SrTiO ₃ . Nguyên tử Sr đặt ở góc, nguyên tử Ti đặt tại tâm và các nguyên tử oxy O đặt tại tâm mặt của ô cơ sở.	70
Hình 2.2. Sự thay đổi thể tích của SrTiO ₃ theo nhiệt độ từ tính toán và thực nghiệm.	71
Hình 2.3. Sự phụ thuộc nhiệt độ của hệ số nở dài của SrTiO ₃	72
Hình 2.4. Nhiệt dung đẳng tích của SrTiO ₃ như là hàm của nhiệt độ.	74
Hình 2.5. Sự phụ thuộc nhiệt độ của nhiệt dung đẳng áp C_p của SrTiO ₃	75
Hình 2.6. Ô cơ sở của BaTiO ₃ cấu trúc lập phương	76
Hình 2.7. Sự thay đổi hằng số mạng của BaTiO ₃ theo nhiệt độ ở áp suất $P = 0GPa$	78

Hình 2.8. Sự phụ thuộc nhiệt độ của hệ số nở dài của BaTiO ₃ ở áp suất $P = 0 \text{ GPa}$.	79
Hình 2.9. Nhiệt dung đẳng tích C_V của BaTiO ₃ ở áp suất $P = 0 \text{ GPa}$.	80
Hình 2.10. Sự phụ thuộc nhiệt độ của nhiệt dung đẳng áp C_p của BaTiO ₃ ở áp suất $P = 0 \text{ GPa}$.	80
Hình 3. 1. Sự thay đổi hằng số mạng của SrTiO ₃ theo áp suất ở các nhiệt độ 298 K (a), 381 K (b) và 467 K (c).	89
Hình 3. 2. Sự phụ thuộc áp suất của hệ số nở dài của SrTiO ₃ ở nhiệt độ 298 K, 381 K và 464K.	90
Hình 3.3. Sự phụ thuộc của nhiệt dung đẳng tích C_V của SrTiO ₃ vào áp suất ở các nhiệt độ 298 K, 381 K và 464 K.	91
Hình 3.4. Sự phụ thuộc áp suất của nhiệt dung đẳng áp C_p của SrTiO ₃ ở nhiệt độ 298 K, 381 K và 464 K.	92
Hình 3.5. Sự phụ thuộc áp suất của thể tích của BaTiO ₃ ở nhiệt độ 300 K....	95
Hình 3.6. Sự phụ thuộc áp suất của hệ số nở dài của BaTiO ₃ ở 400 K, 800 K và 1200 K.	96
Hình 3.7. Sự phụ thuộc áp suất của nhiệt dung đẳng tích C_V của BaTiO ₃ ở nhiệt độ 400 K, 500 K và 600 K.	97
Hình 3.8. Sự thay đổi của nhiệt dung đẳng áp của BaTiO ₃ theo áp suất ở nhiệt độ 400 K, 500 K và 600 K.	98

PHẦN MỞ ĐẦU

1. Lí do chọn đề tài

Vật liệu có cấu trúc perovskite ABO_3 , trong đó A, B là các ion dương và B thường là kim loại chuyển tiếp đã được phát hiện và nghiên cứu từ thế kỉ 18 [38], [64], [124]. Hiện nay, vật liệu perovskite đang được các nhà khoa học trên thế giới cũng như ở Việt Nam [19], [51], [65], [67], [89], [102], [120] quan tâm, nghiên cứu, đã có nhiều bài báo khoa học về vật liệu này và số công trình nghiên cứu ngày càng tăng lên trong những năm gần đây [101]. Đặc biệt, việc khám phá ra hiệu ứng từ trở khổng lồ trong các hợp chất perovskite manganite đã mở ra một hướng nghiên cứu mới rất thú vị [3]. Những hợp chất này xuất hiện nhiệt độ chuyển pha kim loại - điện môi/bán dẫn T_P và nhiệt độ chuyển pha sắt từ - thuận từ T_C . Đặc tính cơ bản của vật liệu này là từ trở của mẫu lớn khi ở gần nhiệt độ T_P . Tuy nhiên sự tương quan điện tử - phonon, biến dạng mạng Jahn - Teller, hiệu ứng polaron cũng ảnh hưởng rõ rệt đến tính chất của các vật liệu.

Vật liệu perovskite có thể được sử dụng làm vật liệu cách điện, tích điện, bộ nhớ, làm đế chế tạo vật liệu siêu dẫn, làm thiết bị quang học, thiết bị chuyển đổi năng lượng mặt trời [4], [6], [76], [80], [114], [118], [128]. Đặc biệt với cấu trúc có sự thay đổi của pha đối xứng, vật liệu này hứa hẹn những tiềm năng ứng dụng như có thể thay đổi từ sắt điện sang phản sắt điện,...

Vật liệu cấu trúc perovskite ABO_3 có cấu trúc tinh thể đặc trưng với sự tồn tại các bát diện BO_6 nội tiếp trong ô mạng cơ sở và sắp xếp cạnh nhau. Mỗi bát diện BO_6 được tạo thành từ 6 ion âm oxi tại đỉnh của bát diện và một ion dương B nằm tại tâm bát diện. Sự thay đổi cấu trúc tinh thể hay thay đổi cấu trúc bát diện quyết định sự thay đổi nhiều tính chất vật lí của vật liệu perovskite. Một trong những nguyên nhân quan trọng kể đến là yếu tố nhiệt

độ và áp suất. Ví dụ cấu trúc lập phương của mạng tinh thể một số vật liệu là ổn định ở nhiệt độ cao ($T > 1000\text{K}$) nhưng không ổn định ở nhiệt độ thấp [1].

Vật liệu cấu trúc perovskite đặc trưng có thể kể đến là Strontium titanate (SrTiO_3) và Barium titanate (BaTiO_3) [107]. Chúng thuộc các perovskite ABO_3 , đã sớm được tìm thấy và có nhiều ứng dụng trong khoa học, công nghệ. SrTiO_3 có thể ứng dụng làm sensor [32], pin nhiên liệu [17], đế siêu dẫn [60],... và đã đang được nhiều nhà khoa học quan tâm nghiên cứu [35], [104], [131], [135]. Thêm vào đó, BaTiO_3 cũng có nhiều ứng dụng trong công nghệ như làm bộ nhớ, bộ lưu trữ năng lượng,... đã, đang thu hút nhiều sự quan tâm và nghiên cứu của nhiều nhà khoa học [2], [54], [74], [81], [99], [103], [129].

Đến nay, có rất nhiều những nghiên cứu về tính chất điện, sắt từ, .. của vật liệu perovskite, nhưng còn ít nghiên cứu về tính chất nhiệt động của vật liệu này. Nhiều phương pháp được sử dụng để nghiên cứu tính chất nhiệt động của vật liệu perovskite, như phương pháp động lực học phân tử [35], [59], [108], phương pháp ab initio [73], [88], [122] và đã đạt được một số kết quả nhất định. Gần đây, phương pháp lưới chia ion mở rộng cũng được áp dụng để nghiên cứu tính chất nhiệt động của một số loại vật liệu perovskite [14], [15]. Tuy nhiên, trong một số nghiên cứu, như [14], [15], [73], [122] chưa xem xét đầy đủ đến hiệu ứng phi điều hòa của dao động mạng. Hơn nữa, sự phụ thuộc nhiệt độ và áp suất của các đại lượng nhiệt động đối với các vật liệu cấu trúc perovskite chưa được nghiên cứu một cách đầy đủ, chi tiết và có hệ thống.

Trong những năm gần đây, phương pháp thống kê mô men (PPTKMM) đã thành công trong nghiên cứu các tính chất nhiệt động và đàn hồi của tinh thể kim loại, hợp kim, bán dẫn ... cho kết quả phù hợp tốt với thực nghiệm khi tính đến ảnh hưởng phi điều hòa của dao động mạng [39], [45], [46], [47],

[48], [68], [90], [92], [95], [115], [121]. Hiệu ứng phi điều hòa có thể được kể đến ở các bậc cao, giải thích và cho kết quả ở các vùng nhiệt độ và áp suất khác nhau. Tuy nhiên phương pháp thống kê mô men chưa được áp dụng để nghiên cứu tính chất nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite.

Với những lí do như đã trình bày ở trên, trong nghiên cứu của luận án chúng tôi áp dụng phương pháp thống kê mô men để nghiên cứu tính chất nhiệt động của vật liệu perovskite với đề tài là “*Nghiên cứu tính chất nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite bằng phương pháp thống kê mô men*”.

2. Mục đích

Mục đích của luận án là áp dụng phương pháp thống kê mô men để nghiên cứu tính chất nhiệt động vật liệu cấu trúc perovskite. Cụ thể là, phương pháp thống kê mô men sẽ được áp dụng để xây dựng biểu thức giải tích cho năng lượng tự do và các đại lượng nhiệt động ở nhiệt độ T và áp suất P của các vật liệu cấu trúc perovskite có pha tinh thể lập phương. Các kết quả lí thuyết được áp dụng tính số cho vật liệu perovskite SrTiO_3 và BaTiO_3 pha tinh thể lập phương, rồi so sánh với thực nghiệm và một số kết quả tính toán khác.

3. Đối tượng và phạm vi nghiên cứu

Đối tượng nghiên cứu là vật liệu cấu trúc perovskite.

Phạm vi nghiên cứu: Luận án tập trung nghiên cứu tính chất nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite pha tinh thể lập phương trong các vùng nhiệt độ và áp suất khác nhau.

4. Phương pháp nghiên cứu

Phương pháp thống kê mô men là phương pháp lí thuyết nghiên cứu tính chất vật lí của nhiều vật liệu với cấu trúc tinh thể có tính đến hiệu ứng phi điều hòa của dao động mạng. Phương pháp này được phát triển và đã được áp dụng cho nghiên cứu nhiều tính chất của vật liệu, như tính chất nhiệt động và đàn hồi

của các tinh thể lập phương tâm khối và tâm diện, kim loại khuyết tật, hợp kim và hợp chất bán dẫn; sự biến dạng đàn hồi phi tuyến và quá trình truyền sóng đàn hồi trong kim loại, hợp kim ... cùng với nhiều công bố khoa học trên các tạp chí uy tín. Các kết quả tính toán khi sử dụng phương pháp thống kê mô men phù hợp với các kết quả lý thuyết và thực nghiệm khác.

Trong luận án này, phương pháp thống kê mô men được sử dụng để nghiên cứu tính chất nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite. Hiệu ứng phi điều hòa được kể đến trong gần đúng lũy thừa bậc bốn của độ dời nguyên tử khỏi vị trí cân bằng. Qua các công thức mô men cho phép tính được thế tương tác, năng lượng tự do và các đại lượng nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite. Lựa chọn biểu thức và tối ưu các tham số cho thế năng tương tác giữa các nguyên tử trong SrTiO_3 và BaTiO_3 , các đại lượng nhiệt động của các vật liệu này được tính số trong các vùng nhiệt độ và áp suất khác nhau. Kết quả thu được sẽ được phân tích, đánh giá kết hợp so sánh với kết quả lý thuyết và thực nghiệm khác.

5. Ý nghĩa khoa học và thực tiễn của luận án

Đối tượng nghiên cứu của luận án là lớp các vật liệu cấu trúc perovskite đã và đang được quan tâm nghiên cứu rộng rãi và có nhiều ứng dụng quan trọng trong khoa học, công nghệ và sản xuất. Các kết quả của luận án sẽ là các thông tin về tính chất nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite SrTiO_3 và BaTiO_3 ở pha tinh thể lập phương.

Kết quả thu được trong luận án minh chứng bằng bài báo khoa học uy tín sẽ khẳng định sự đúng đắn, phù hợp của mô hình nghiên cứu đã xây dựng và phương pháp mô men trong nghiên cứu tính chất nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite ở pha tinh thể lập phương. Các phương trình và biểu thức giải

tích được xây dựng có thể áp dụng cho lớp các vật liệu cấu trúc perovskite pha tinh thể lập phương.

Hơn nữa, biểu thức thế năng tương tác cặp, cùng với bộ tham số tương ứng, phù hợp trong nghiên cứu vật liệu cấu trúc perovskite SrTiO_3 và BaTiO_3 đã được đưa ra. Kết quả trong luận án cho thấy phương pháp thống kê mô men hoàn toàn có thể được mở rộng, phát triển và áp dụng để nghiên cứu lớp vật liệu cấu trúc perovskite pha tinh thể lập phương. Nó cũng có thể dự đoán tính chất nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite SrTiO_3 và BaTiO_3 pha tinh thể lập phương trong vùng áp suất cao hoặc nhiệt độ cao. Các kết quả tính số của các đại lượng nhiệt động là nguồn tham khảo có giá trị khoa học cho những nghiên cứu tiếp theo.

Các kết quả nghiên cứu của luận án có ý nghĩa quan trọng đối với ngành công nghệ chế tạo để làm vật liệu siêu dẫn nhiệt độ cao và một số cảm biến hoặc thiết bị sử dụng vật liệu perovskite.

6. Những đóng góp mới của luận án

Luận án sử dụng phương pháp thống kê mô men đối với vật liệu cấu trúc perovskite pha tinh thể lập phương. Kết quả thu được có giá trị khoa học và phù hợp thực nghiệm và tính toán khác, điều này được minh chứng qua các bài báo khoa học đăng trên tạp chí uy tín. Trên cơ sở này, luận án cung cấp phương pháp lí thuyết hiệu quả trong nghiên cứu tính chất nhiệt động lớp vật liệu cấu trúc perovskite pha tinh thể lập phương.

Tìm được biểu thức thế năng tương tác cặp, cùng với bộ tham số tương ứng, phù hợp trong nghiên cứu vật liệu cấu trúc perovskite SrTiO_3 và BaTiO_3 . Biểu thức thế năng tương tác này phù hợp cho nghiên cứu hệ có tương tác bao gồm kết hợp cả tương tác cộng hóa trị và tương tác Coulomb giữa các ion tích điện.

Xây dựng được các biểu thức giải tích tính năng lượng và các đại lượng nhiệt động của lớp vật liệu cấu trúc perovskite pha tinh thể lập phương có kể đến hiệu ứng phi điều hòa của dao động mạng tinh thể. Dựa vào các biểu thức đó, các đại lượng nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite ở nhiều vùng nhiệt độ và áp suất khác nhau được tính số. Kết quả tính số một số đại lượng nhiệt động của SrTiO₃ cho sự phù hợp với thực nghiệm tốt hơn kết quả về bài toán tương tự theo phương pháp lí thuyết ab initio. Quy luật biến đổi của một số đại lượng nhiệt động của SrTiO₃ có sự phù hợp với thực nghiệm tốt hơn một số nghiên cứu tính toán bằng phương pháp động lực học phân tử.

Các kết quả có được từ luận án đã có những đóng góp mới cho các nghiên cứu lí thuyết và thực nghiệm về ảnh hưởng của nhiệt độ và áp suất lên tính chất nhiệt động của một số perovskite như SrTiO₃, BaTiO₃. Lí thuyết mà chúng tôi xây dựng cho tính chất nhiệt động của vật liệu perovskite đã góp phần hoàn thiện và phát triển phương pháp thống kê mô men trong nghiên cứu tính chất nhiệt động của vật liệu tinh thể.

7. Bộ cục của luận án

Ngoài các phần Mở đầu, Kết luận, Tài liệu tham khảo, Phụ lục, nội dung luận án được trình bày trong 3 chương như sau:

Chương 1: Tổng quan về vật liệu cấu trúc perovskite và phương pháp nghiên cứu.

Chương 2: Nghiên cứu tính chất nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite ở áp suất $P = 0$ GPa bằng phương pháp thống kê mô men.

Chương 3: Nghiên cứu ảnh hưởng của áp suất lên tính chất nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite bằng phương pháp thống kê mô men.

Chương 1 sẽ giới thiệu tổng quan về cấu trúc và một số ứng dụng của vật liệu cấu trúc perovskite. Hơn nữa, chương này sẽ tổng quan một số phương pháp lí thuyết hiện nay (như phương pháp động lực học phân tử, phương pháp

ab initio) đã, đang được sử dụng trong nghiên cứu tính chất nhiệt động của vật liệu này. Qua đó chỉ ra các ưu, nhược điểm của các phương pháp này và những vấn đề hiện còn đang tranh luận. Ngoài ra, chương 1 còn giới thiệu các nội dung cơ bản của phương pháp thống kê mô men là phương pháp được sử dụng để nghiên cứu trong luận án.

Chương 2 sẽ trình bày việc sử dụng các kết quả của phương pháp mô men để xây dựng các biểu thức giải tích cho đại lượng nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite pha tinh thể lập phương có kể đến hiệu ứng dao động phi điều hòa trong gần đúng lũy thừa bậc bốn của độ dời của nguyên tử khỏi vị trí cân bằng. Từ biểu thức đó, các đại lượng nhiệt động của vật liệu perovskite được tính số tại một số nhiệt độ và áp suất $P = 0$ GPa. Sự lựa chọn và tối ưu tham số thể tương tác, phù hợp cho các loại tương tác trong vật liệu perovskite SrTiO_3 và BaTiO_3 pha tinh thể lập phương, sẽ cho phép tính số các đại lượng nhiệt động của các vật liệu đó. Kết quả tính số sẽ được phân tích và so sánh với các kết quả nghiên cứu lý thuyết và thực nghiệm khác. Các kết quả thu được sẽ giúp đưa ra các kết luận về phương pháp nghiên cứu và tính chất nhiệt động của vật liệu perovskite SrTiO_3 và BaTiO_3 pha tinh thể lập phương ở áp suất $P = 0$ GPa.

Chương 3 sẽ trình bày nội dung về thiết lập phương trình trạng thái, xây dựng các biểu thức giải tích cho các đại lượng nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite pha tinh thể lập phương ở áp suất khác nhau, có kể đến hiệu ứng dao động phi điều hòa trong gần đúng lũy thừa bậc bốn của độ dời của nguyên tử khỏi vị trí cân bằng. Các biểu thức đó sẽ giúp tính số đại lượng nhiệt động của vật liệu SrTiO_3 và BaTiO_3 tại áp suất khác nhau. Kết quả tính số được phân tích và so sánh với các kết quả nghiên cứu lý thuyết và thực nghiệm khác. Các kết quả thu được sẽ giúp đưa ra các kết luận về phương pháp nghiên cứu và ảnh

hưởng của áp suất lên tính chất nhiệt động của vật liệu perovskite SrTiO_3 và BaTiO_3 pha tinh thể lập phương.

Nội dung của luận án đã được tác giả báo cáo trong Hội nghị vật lý lý thuyết Việt Nam lần thứ 46 (2021), Hội nghị vật lý lý thuyết Việt Nam lần thứ 47 (2022) và công bố 03 bài báo khoa học đăng trên tạp chí quốc tế thuộc danh mục Web of Science và trong nước.

CHƯƠNG 1. TỔNG QUAN VỀ VẬT LIỆU CẤU TRÚC PEROVSKITE VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

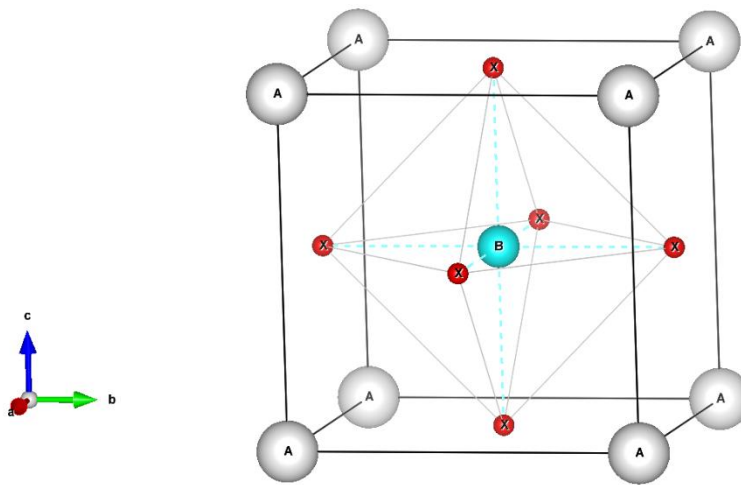
Chương này sẽ giới thiệu tổng quan về cấu trúc tinh thể, một vài ứng dụng của vật liệu cấu trúc perovskite và một số phương pháp lý thuyết hiện nay (như phương pháp động lực học phân tử, phương pháp ab initio) đã và đang được sử dụng trong nghiên cứu tính chất nhiệt động của vật liệu này. Qua đó, chương 1 sẽ chỉ ra một số vấn đề còn chưa nghiên cứu hoặc hiện còn đang tranh luận trong một số kết quả nghiên cứu. Ngoài ra, chương 1 còn giới thiệu các nội dung cơ bản và một số kết quả nghiên cứu thành công của phương pháp thống kê mô men là phương pháp được sử dụng để nghiên cứu trong luận án.

1.1. Vật liệu cấu trúc perovskite và một số ứng dụng

1.1.1. Cấu trúc tinh thể của vật liệu cấu trúc perovskite

Perovskite là tên gọi thường được sử dụng cho các vật liệu có cấu trúc tinh thể giống với cấu trúc tinh thể của vật liệu gốm canxi titanate (CaTiO_3). Vật liệu cấu trúc perovskite trở thành những đối tượng thu hút được sự quan tâm của nhiều nhà khoa học bởi những tính chất thú vị và ứng dụng của chúng. Một số tính chất vật lý thú vị của các vật liệu này có thể kể đến như tính chất siêu dẫn, tính chất từ, tính chất điện, Có nhiều vật liệu cấu trúc perovskite được phát hiện như CaTiO_3 , BaTiO_3 , SrTiO_3 , CdTiO_3 , PbTiO_3 , SrZrO_3 , BaZrO_3 , KNbO_3 , LiNbO_3 , LiTaO_3 , BaPrO_3 , CsCaF_3 , LiBaF_3 ,

Cấu trúc perovskite có tính đối xứng cao là đối xứng lập phương. Một ô cơ sở của tinh thể cấu trúc perovskite có đối xứng lập phương ($Pm\bar{3}m$) có thể mô tả trên Hình 1.1.



Hình 1.1. Ô cơ sở của tinh thể perovskite cấu trúc lập phương.

Một ô cơ sở thường chứa 1 phân tử với công thức hóa học dạng tổng quát ABX_3 , trong đó A và B là ion dương và X là ion âm. Các nguyên tử của nguyên tố có thể chiếm các vị trí của A, B và X được liệt kê và trình bày trong Hình 1.2.

Li	Be												B	C	N	O	F
Na	Mg												Al	Si	P	S	Cl
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	
Cs	Ba	La-Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	
		Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
		Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

Hình 1.2. Các phần tử trong bảng tuần hoàn các nguyên tố hóa học có thể chiếm đóng 3 vị trí A, B và X trong cấu trúc tinh thể vật liệu perovskite [101].

X thường hay gặp là oxi, nên cấu trúc vật liệu perovskite thường gặp có dạng ABO_3 . Trong mô tả hình thức thì A là ion dương có điện tích +2, viết dạng

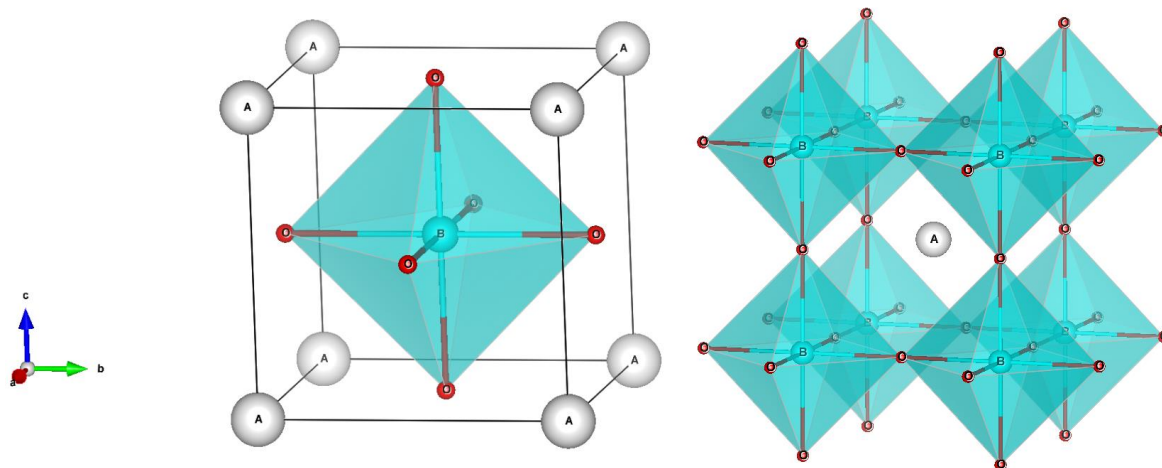
A^{+2} . B là ion dương có điện tích +4, thường viết dạng B^{+4} . A^{+2} và B^{+4} có kích thước khác nhau. A^{+2} có kích thước lớn hơn B^{+4} . X là ion âm có điện tích -2, viết ở dạng X^{-2} . Trong 1 ô cơ sở, ion A^{+2} có vị trí ở góc, B^{+4} có vị trí ở tâm giữa và X^{-2} có vị trí tại tâm của các mặt hình lập phương của ô cơ sở. X^{-2} liên kết với cả ion A^{+2} và B^{+4} . Mỗi ion B^{+4} trong khoảng lân cận gần nhất có 6 ion âm X^{-2} bao quanh hình thành dạng liên kết hình 8 mặt (octahedron). Ion A^{+2} trong khoảng lân cận gần nhất có 12 ion X^{-2} bao quanh, tạo thành liên kết hình 12 mặt (cuboctahedrons).

Những vật liệu perovskite được nghiên cứu từ những năm 1960 đến nay và có nhiều ứng dụng trong công nghệ và thiết bị [4]. Vật liệu oxit perovskite ba thành phần có công thức chung là ABO_3 và được đặt tên theo tên nhà bác học người Nga Lev Alexeievitch Perovsky. Tùy theo các điều kiện nhiệt độ và áp suất, vật liệu perovskite có chuyển pha từ cấu trúc tinh thể có đối xứng cao lập phương với nhóm không gian $Pm3m$ tới các đối xứng thấp hơn. Sự ổn định cấu trúc của tinh thể perovskite được xác định theo số hạng cấu trúc Goldschmidt t , được xác định bởi liên hệ kích thước của các ion A (R_A), ion B (R_B) và oxi (R_O), trong phương trình liên hệ [36],

$$t = \frac{R_A + R_O}{\sqrt{2}(R_B + R_O)} \quad (1.1)$$

Tham số t là tham số hình học, mô tả sự phù hợp vị trí của ion A với ion B và được giải thích trong nhiều nghiên cứu [52], [77], [116], [137]. Đến nay, tham số t được chấp nhận rộng rãi, coi như là tiêu chí xác định sự hình thành của cấu trúc perovskite. Có nhiều nghiên cứu và thảo luận về sự ổn định trong cấu trúc vật liệu perovskite [77], [110], [126], [137]. Perovskite với cấu trúc lập phương có t thỏa mãn $0.89 \leq t \leq 1$. Trong cấu trúc perovskite lí tưởng ABO_3 , bán kính ion A thường lớn hơn bán kính ion B, gần với bán kính của ion O và số hạng t gần bằng 1. Ion A được bao quanh bởi 12 ion âm O tạo thành khối 12

mặt AO_{12} và ion B bao quanh bởi 6 ion âm O tạo thành khối bát diện BO_6 được mô tả trong Hình 1.3.



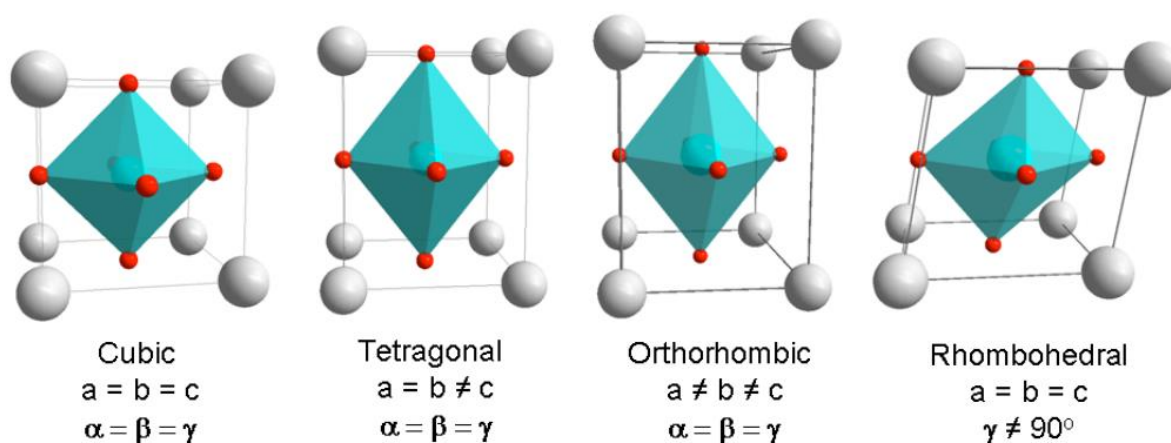
Hình 1.3. Cấu trúc perovskite ABO_3 .

Những ion ở vị trí O có cùng tọa độ với 2 ion ở vị trí B và 4 ion ở vị trí A. Do đó cấu trúc tinh thể trong không gian có sự kết nối góc giữa các bát diện BO_6 và các ion dương A được đặt ở khoảng giữa 8 bát diện. Ion dương B có vị trí ở tâm các bát diện BO_6 và ion A chiếm vị trí giữa các bát diện.

Nếu kích thước của ion A giảm thì t trở nên nhỏ hơn 1, khối tám mặt BO_6 sẽ nghiêng hoặc quay để lấp đầy không gian. Kết quả dẫn đến sự thay đổi cấu trúc từ cấu trúc lập phương (cubic) để trở thành cấu trúc thoi (orthorhombic), cấu trúc tứ diện (tetragonal), cấu trúc đơn tà (monoclinic), hoặc cấu trúc tam tà (triclinic).

Ở nhiệt độ phòng, khi $t < 1$ sẽ dẫn tới sự quay của khối bát diện BO_6 cùng với mở rộng độ dài liên kết B-O và thu hẹp độ dài liên kết A-O. Như vậy, sự nghiêng của khối bát diện BO_6 gây ra biến dạng của nhóm AO_{12} , làm giảm đối xứng của hệ [34], [87]. Do đó, tính chất của vật liệu perovskite ABO_3 có thể được tạo ra chủ yếu từ các khối đa diện cấu tạo nên, như các khối bát diện BO_6 và khối 12 mặt AO_{12} . Sự không tương đương hoặc không phù hợp của hai nhóm BO_6 và AO_{12} có thể gây ra sự biến dạng và ảnh hưởng đáng kể lên tính

chất của vật liệu như trong hình 1.4. Ví dụ như hiện tượng từ trở khổng lồ trong vật liệu perovskite $R_{1-x}AMnO_3$ với R là phần tử đất hiếm và A là Ca, Sr hoặc Ba [123], [113], hiện tượng siêu dẫn [5], hiện tượng chuyển pha kim loại – phi kim [105], [106],...



Hình 1.4. Một số dạng cấu trúc tinh thể của vật liệu cấu trúc perovskite.

Tuy vậy, bởi vì các ion dương ở vị trí A, có bán kính khác nhau phân bố tùy ý nên các kiểu và độ lớn sự uốn cong liên kết B-O-B là tùy ý và không đồng nhất trong toàn tinh thể vật liệu. Sự mất trật tự của các khối 12 mặt AO_{12} ảnh hưởng đến sự uốn cong cục bộ tùy ý của các liên kết B-O-B và điều này trở nên đặc biệt khi sự tăng số liên kết B-O-B bị uốn cong đi kèm với việc tăng sự mất trật tự.

Khi $t > 1$, các lớp AO_3 chứa một chuỗi xếp chồng chặt của hình lục giác hoặc kết hợp lục giác và lập phương. Sự xếp chồng của các lớp lục giác luôn bổ sung bởi sự chia sẻ các mặt chung của các khối bát diện BO_6 và hình thành liên kết B-O-B với góc liên kết 90° . Sự ổn định của perovskite cấu trúc lục giác phụ thuộc mạnh vào bổ sung lực đẩy tĩnh điện giữa các ion dương của các khối bát diện liền kề có chung mặt bên [132], [8].

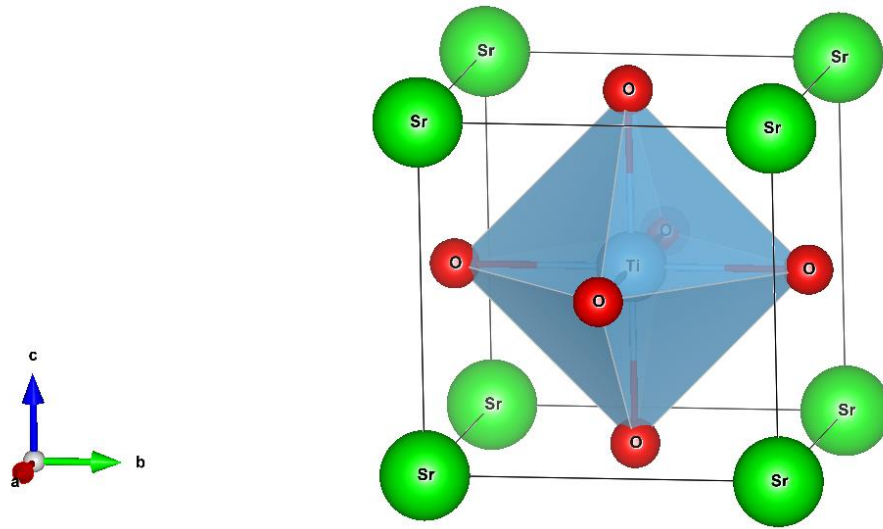
Trong vật liệu perovskite, sự thay đổi thứ tự hoặc bậc tự do của các ion dương cũng làm thay đổi cấu trúc, sự ổn định pha hoặc tính chất của vật liệu.

Sự sắp xếp thứ tự các ion trong tinh thể vật liệu này thường ổn định khi hai ion dương chiếm trên cùng vị trí khác nhau đủ lớn về phối vị, hóa trị hoặc kích thước [21].

Trong perovskite có khuyết tật với nhiều vị trí trống oxy, thứ tự đặc trưng của ion dương (hay vị trí khuyết oxy) được hình thành do phối vị của các ion dương ở vị trí B. Sự sắp xếp thường gặp theo cách này là sắp xếp theo hướng [100] của các ion ở vị trí B để tạo thành các ion dương B^I hoặc B^{II}. Sự ổn định nhiệt động của thứ tự ion dương khi đó được quyết định bởi sự khác nhau về điện tích và kích thước của ion dương B^I và B^{II}. Do đó, có sự hình thành nên các cấu trúc của vật liệu perovskite có dạng A(B^I_xB^{II}_y)O₃ [21], như Bi(Zn_{1/2}Ti_{1/2})O₃ [112] La(Li_{1/3}Ti_{2/3})O₃ [9], Ba(Re_{1/4}Cr_{3/4})O₃, Sr(Na_{1/4}Ta_{3/4})O₃ [29], [43],...

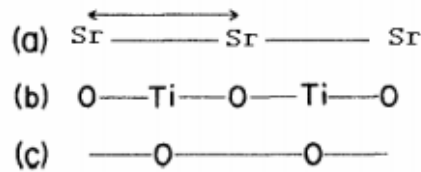
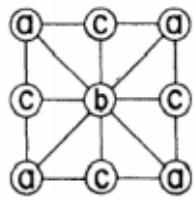
Strontium titanate (SrTiO₃) thuộc loại vật liệu perovskite ABO₃. Ở nhiệt độ phòng SrTiO₃ có cấu trúc lập phương với hệ số $t = 1$, nhóm không gian $Pm3m$, hằng số mạng là 3.905 Å và mật độ là 5.12 g/cm³. Ô cơ sở của mạng tinh thể SrTiO₃ có dạng như trong Hình 1.5.

Ion dương Ti⁴⁺ có số phối vị là 6, được bao quanh bởi 6 ion O²⁻ tạo thành khối bát diện TiO₆. Ion Sr²⁺ được bao quanh bởi 4 khối bát diện TiO₆ và có số phối vị là 12, với 12 ion O²⁻ ở khoảng lân cận gần nhất. Trong khối TiO₆ có sự xen phủ của trạng thái O-2p với trạng thái Ti-3d tiến tới hình thành liên kết cộng hóa trị [69]. Do đó, SrTiO₃ là vật liệu có trộn lẫn của liên kết ion và liên kết cộng hóa trị.

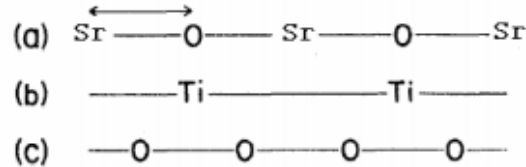
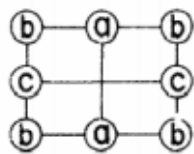


Hình 1.5. Ô cơ sở của SrTiO₃.

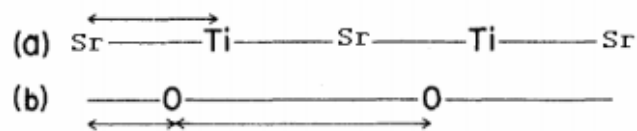
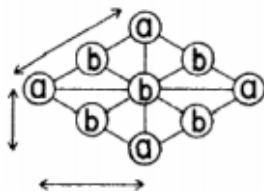
[100]



[110]



[111]



Hình 1.6. Sự sắp xếp các mặt phẳng nguyên tử trong tinh thể SrTiO₃.

Có thể kể đến trong cấu trúc mạng tinh thể của SrTiO₃, theo mỗi hướng [h, l, k] thì luôn có hai loại mặt phẳng nguyên tử không gian xen kẽ, có diện tích bằng nhau và được chỉ như trong Hình 1.6.

Một sự biến dạng sẽ làm thay đổi đối xứng của mạng tinh thể SrTiO_3 từ lập phương xuống đối xứng thấp hơn bởi sự hạ thấp nhiệt độ, hoặc thay đổi áp suất hoặc pha trộn tạp chất. Sự biến dạng trong SrTiO_3 làm xuất hiện một số hiệu ứng biến dạng gồm hiệu ứng kích thước, sự lệch mạng từ cấu trúc lý tưởng hoặc hiệu ứng Jahn- Teller. SrTiO_3 có sự chuyển pha từ lập phương (cubic) tới cấu trúc tứ diện (tetragonal) khi nhiệt độ giảm tới 110K do sự quay ngược nhau của các khối bát diện TiO_6 liền kề, chuyển tới pha hệ thoi (orthorhombic) khi nhiệt độ giảm tới 55K và chuyển tới pha hệ mặt thoi (rhombohedral) khi nhiệt độ giảm tới 10K [79].

1.1.2. Một số ứng dụng của vật liệu cấu trúc perovskite

1.1.2.1. Ứng dụng làm vật liệu thuận điện lượng tử

Trạng thái thuận điện lượng tử là xu hướng của vật liệu biểu hiện trạng thái chuyển pha xảy ra ở nhiệt độ đủ thấp để kích hoạt hiệu ứng lượng tử trong vật liệu và do đó trạng thái chuyển pha sắt điện có thể không xuất hiện [125]. Hiệu ứng này với một vài vật liệu perovskite như SrTiO_3 xuất hiện trạng thái thuận điện lượng tử ở dưới 4K [86]. Khi một lượng nhỏ tạp chất được thêm vào, lớp vật liệu perovskite xuất hiện trạng thái kiểu sắt điện và được xếp vào loại vật liệu sắt điện ban đầu. Vật liệu thuận điện lượng tử với khả năng điều chỉnh trường là loại vật liệu mang nhiều hứa hẹn cho các ứng dụng trong thiết bị giao tiếp thế hệ tiếp theo.

2.1.2.2. Vật liệu perovskite làm đế chế tạo siêu dẫn nhiệt độ cao

Trong khi tìm kiếm siêu dẫn mới bằng kỹ thuật hóa học tinh thể và tìm ra vật liệu thay thế mới có nhiệt độ T_c tăng thì sự lựa chọn vật liệu làm đế phù hợp cho quá trình chế tạo siêu dẫn nhiệt độ cao là sự quan trọng hàng đầu, tuy nhiên đã gặp phải những điều kiện ràng buộc khó khăn và ít được chú ý. Trong ứng dụng của vật liệu cấu trúc perovskite làm đế, đặc tính quan trọng phải kể đến đó là tính chất nhiệt động của vật liệu, như sự dẫn nở vì nhiệt và sự dẫn nhiệt

và đặc trưng về điện, như là tổn thất điện môi, hằng số điện môi và hệ số điện môi đều thay đổi nhỏ với nhiệt độ. Trọng tâm chính của các tiêu chuẩn chọn lựa là tốc độ và sự giảm hiệu ứng nhiệt lên tín hiệu. Trong bộ cộng hưởng, các giá trị của hằng số được điều chỉnh theo kích thước của thiết bị yêu cầu. Khi chúng ta tìm kiếm siêu dẫn nhiệt độ cao để sử dụng trong các thiết bị như vậy thì những yêu cầu thêm cho để cũng được đưa ra. Ví dụ, tham số mạng tinh thể phù hợp được yêu cầu để chế tạo có chất lượng màng siêu dẫn nhiệt độ cao trên một đế là vật liệu perovskite tinh thể. Có một số vật liệu được đề xuất thích hợp cho thiết bị chế tạo từ siêu dẫn nhiệt độ cao. Đầu tiên kể đến và có tính sử dụng rộng rãi là LaAlO_3 . Tuy nhiên, vấn đề gặp phải của vật liệu này là vẫn còn ảnh hưởng đến chất lượng của màng siêu dẫn nhiệt độ cao và hiệu suất của thiết bị. Do đó mục tiêu hướng đến để thiết kế và phát triển các đế mới phù hợp và có chất lượng hơn LaAlO_3 . Nhiều nghiên cứu về thiết kế và kỹ thuật của vật liệu làm đế phù hợp cho quá trình lắng đọng màng mỏng siêu dẫn nhiệt độ cao đã chỉ ra một số vật liệu phù hợp như $\text{Ba}(\text{Mg}_{1/3}\text{Ta}_{2/3})\text{O}_3$, $\text{Sr}(\text{Al}_{1/2}\text{Ta}_{1/2})_3$, $\text{Sr}(\text{Al}_{1/2}\text{Nb}_{1/2})\text{O}_3$ [107].

1.1.2.3. Ứng dụng làm điốt điện dung

Cả hai pha sắt từ và thuận từ của vật liệu perovskite có thể ứng dụng cho thiết bị điều hướng vi sóng. Tuy nhiên, pha thuận điện có ưu điểm phù hợp hơn vì không có hiện tượng trễ xảy ra. Do đó, các perovskite thuận điện, như SrTiO_3 , KTaO_3 và CaTiO_3 , đã được nghiên cứu trong một thời gian [72]. Trong thiết bị sử dụng cấu trúc màng mỏng của loại vật liệu này, đặc biệt $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$, đã thu được điện trường cao ở nhiệt độ phòng dưới điện thế một chiều thấp. $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$ đã trở thành sự lựa chọn cho ứng dụng trong công nghiệp và nghiên cứu ở tần số vi ba. Hơn nữa, nhiệt độ chuyển pha Curie của vật liệu có thể điều chỉnh dễ dàng bởi thay đổi thành phần Ba [93]. Thiết bị sắt điện thường

phụ thuộc vào các tham số bao gồm thành phần, sức căng, khuyết tật, kết nối giữa điện cực và vật liệu sắt điện, phương pháp chế tạo, ...

2.1.2.4. Ứng dụng làm thiết bị chuyển đổi năng lượng mặt trời và máy dò quang

Vật liệu perovskite đã đang được nghiên cứu tích cực cho việc chuyển đổi năng lượng mặt trời vì chúng có vị trí vùng cấm dẫn điện cao, có sự ổn định và có vùng cấm hấp thụ năng lượng mặt trời. Những vật liệu perovskite có thể sử dụng làm bộ lưu trữ năng lượng mặt trời như PbTiO_3 , SrTiO_3 [127], BaTiO_3 , KTaO_3 , BiFeO_3 [93], [30], $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ [134].

Perovskite được đánh giá là vật liệu hứa hẹn làm pin năng lượng mặt trời do có chiều dài khuếch tán tốt (lớn hơn 1 μm), nhiệt độ chế tạo thấp, giá thành thấp và có hiệu suất cao. Năm 2009, Kojima và cộng sự lần đầu tiên chế tạo thành công pin mặt trời perovskite [63], đây là bước quan trọng cho sự phát triển của pin mặt trời sau này. Sau đó Burchka và cộng sự chế tạo thành công pin mặt trời perovskite bằng phương pháp lắng đọng hai bước liên tục và hiệu suất chuyển đổi quang điện tăng 15% [12]. Sau đó, hiệu suất của pin mặt trời perovskite được cải thiện bởi thay đổi cấu trúc thiết bị và tối ưu lớp vận chuyển hạt tải [75]. Hơn nữa, năm 2008, hiệu suất của pin mặt trời perovskite đã vượt qua 22% [138] và năm 2022, đã đạt đến giá trị 24% [41].

Nhiều nghiên cứu đã chỉ ra rằng có thể chế tạo máy dò quang từ vật liệu perovskite để phát hiện ánh sáng trong vùng từ UV đến ánh sáng nhìn thấy [136] hoặc phát hiện tia X hoặc tia gama [42]. Máy dò quang perovskite tiếp tục được phát triển và đạt tới hiệu suất cao.

2.1.2.5. Ứng dụng làm bộ nhớ

Bộ nhớ truy cập ngẫu nhiên sắt điện (FeRAM) [16] là một trong những ứng dụng chính của vật liệu perovskite để thay thế bộ nhớ lõi từ, hệ thống nhớ bọt từ và bộ nhớ chỉ đọc xóa bằng điện trong nhiều ứng dụng. Trong Chiến

tranh thế giới thứ II, việc phát hiện Barium titanate (BaTiO_3) có cấu trúc rắn và ổn định hóa học đã khuyến khích các nhà khoa học phát triển thiết bị hai trạng thái và điều khiển bằng điện, vì thiết bị này có thể mã hóa hai trạng thái 1 và 0, điều này cần thiết phù hợp với đại số Boole của bộ nhớ máy tính nhị phân. Tính không biến đổi bên trong (lưu giữ bộ nhớ khi mất điện) và bền với bức xạ của bộ nhớ sắt điện đã chỉ ra một con đường mới để phát triển các bộ nhớ máy tính. Hơn nữa, bộ nhớ truy xuất ngẫu nhiên động (DRAM) là lõi bộ nhớ trong hầu hết các thiết bị điện tử ngày nay. Do rò rỉ điện tích, nó cần làm mới hàng nghìn lần mỗi giây. Quá trình này đòi hỏi nhiều năng lượng hơn và do đó làm tiêu hao pin. Hơn nữa, nó cũng không thể lưu trữ thông tin khi mất điện. Bộ nhớ sắt điện trở thành sự lựa chọn cho tương lai của bộ nhớ lưu trữ, nó có thể lưu trữ dữ liệu trên trạng thái phân cực của vật liệu sắt điện. Sự phát triển của FeRAM có thể tạo ra sự cải thiện đáng kể về trọng lượng, không gian, công suất và tốc độ.

Vật liệu perovskite còn sử dụng cho bộ nhớ điện trở (RRAM), là loại bộ nhớ bền vững dựa trên sự chuyển đổi có thể đảo ngược giữa trạng thái điện trở cao và trạng thái điện trở thấp dưới tác động bởi điện trường. Zhang và cộng sự lần đầu tiên đã giải thích RRAM 64 bit chế tạo từ vật liệu perovskite $\text{Pr}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ [100].

1.2. Tổng quan một số phương pháp nghiên cứu

1.2.1. Tổng quan về phương pháp động lực học phân tử

Động lực học phân tử là một phương pháp mô phỏng máy tính, nó không chỉ cho phép chỉ ra tính chất của vật liệu ở mức độ vĩ mô mà còn giúp để hiểu nền tảng vật lý bên cạnh trạng thái vĩ mô. Ý tưởng cơ bản của động lực học phân tử là để mô phỏng sự chuyển động của những tập hợp nguyên tử và phân tử và khi đó mô phỏng động lực học đưa ra các giá trị trung bình để giải các phương trình dịch chuyển của các hạt có tương tác. Khi thông tin của hệ ở mức

độ nguyên tử được biết, thì các đại lượng vật lý vĩ mô của hệ sẽ tiết lộ qua cơ học thống kê.

Trong mô phỏng động lực học, trạng thái ban đầu sẽ được đề xuất cho các tương tác giữa các nguyên tử và chỉ ra sự ngoại suy tính chất khối. Sự ngoại suy chính xác theo độ chính xác chúng ta đề xuất và phụ thuộc vào giới hạn của máy tính.

Mô phỏng động lực học tác động như cầu nối giữa lý thuyết và thực nghiệm. Một lý thuyết có thể được kiểm tra bằng chạy mô phỏng sử dụng cùng mô hình, mặt khác mô phỏng có thể tiến hành trên hệ máy tính cho những trường hợp khó hoặc không thể thực hiện trong phòng thí nghiệm, ví dụ ở nhiệt độ và áp suất cực cao. Kết quả mô phỏng được so sánh với các phép đo thực nghiệm trên những vật liệu cụ thể.

Để giải phương trình chuyển động trong động lực học phân tử có thể sử dụng phương pháp Euler hoặc thuật toán Verlet. Phương trình dịch chuyển cho mỗi hạt i có dạng

$$\begin{cases} \frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i \\ \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \frac{\vec{F}_i}{m_i} = \vec{a}_i \end{cases} \quad (1.2)$$

Ở đây, \vec{r}_i , \vec{v}_i , \vec{a}_i là vị trí, vận tốc và gia tốc của hạt i . \vec{F}_i là lực tác dụng lên hạt i .

Khi chúng ta chọn δt là bước thời gian, thì sau mỗi bước thời gian phương trình chuyển động có dạng:

$$\vec{r}_i(t + \delta t) = \vec{r}_i(t) + \vec{v}_i(t + \delta t / 2)\delta t \quad (1.3)$$

và

$$\vec{v}_i(t + \delta t) = \vec{v}_i(t) + \vec{a}_i(t + \delta t / 2)\delta t. \quad (1.4)$$

Khi năng lượng thế năng đã biết thì có thể thu được lực tác dụng và gia tốc của hạt, do đó có thể tính được vị trí và vận tốc của hạt. Tuy nhiên phương pháp Euler cho sai số quá lớn. Để tránh sai số lớn của phương pháp Euler, có thể sử dụng giải thuật Verlet cho sai số nhỏ hơn. Theo đó, ta khai triển Taylor cho vị trí

$$\vec{r}_i(t + \delta t) = \vec{r}_i(t) + \delta t \vec{v}_i(t) + \frac{1}{2!} (\delta t)^2 \vec{a}_i(t) + \dots \quad (1.5)$$

và

$$\vec{r}_i(t - \delta t) = \vec{r}_i(t) - \delta t \vec{v}_i(t) + \frac{1}{2!} (\delta t)^2 \vec{a}_i(t) - \dots \quad (1.6)$$

Từ (1.5) và (1.6) ta thu được

$$\vec{r}_i(t + \delta t) = 2\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(t - \delta t) + (\delta t)^2 \vec{a}_i(t). \quad (1.7)$$

Từ đó vận tốc được xác định là

$$\vec{v}_i = \frac{\vec{r}_i(t + \delta t) - \vec{r}_i(t - \delta t)}{2\delta t}. \quad (1.8)$$

Sai số của thuật toán Verlet vào cỡ $(\delta t)^2$. Như vậy trong động lực học phân tử, nó là quan trọng để chọn tham số bước thời gian δt thích hợp. Ngoài ra, còn cần kể đến các tham số khác như điều kiện biên tuần hoàn, bán kính cắt,...

Trong mô phỏng động lực học, các đại lượng nhiệt động được xác định ở nhiệt độ và áp suất khác nhau theo cách sau. Áp suất được xác định bởi

$$P = \frac{Nk_B T}{V} + \frac{\left\langle \sum_i^N \vec{r}_i \cdot \vec{f}_i \right\rangle}{3V}. \quad (1.9)$$

Trong biểu thức trên, N là số hạt trong hệ, k_B là hằng số Boltzmann, V là thể tích, \vec{f}_i là lực tác dụng lên hạt i ở vị trí \vec{r}_i .

Năng lượng của hệ là tổng động năng và thế năng

$$E = K + U, \quad (1.10)$$

với động năng được xác định bởi

$$K = \sum_i^N \frac{1}{2} m_i (v_{ix}^2 + v_{iy}^2 + v_{iz}^2). \quad (1.11)$$

Hệ số nở dài vì nhiệt α_T được tính theo phương trình:

$$\alpha_T = \frac{1}{a_0} \frac{da}{dT}, \quad (1.12)$$

trong đó, a_0 là tham số mạng ở 0°C và a là tham số mạng ở nhiệt độ T .

Hệ số nén đẳng nhiệt được xác định bởi:

$$\chi_T = -\frac{1}{V_0} \frac{dV(P)}{dP}, \quad (1.13)$$

trong đó, V_0 là thể tích ở điều kiện tiêu chuẩn 1atm.

Nhiệt dung đẳng áp được xác định bởi:

$$C_P = \left(\frac{dH}{dT} \right)_P, \quad (1.14)$$

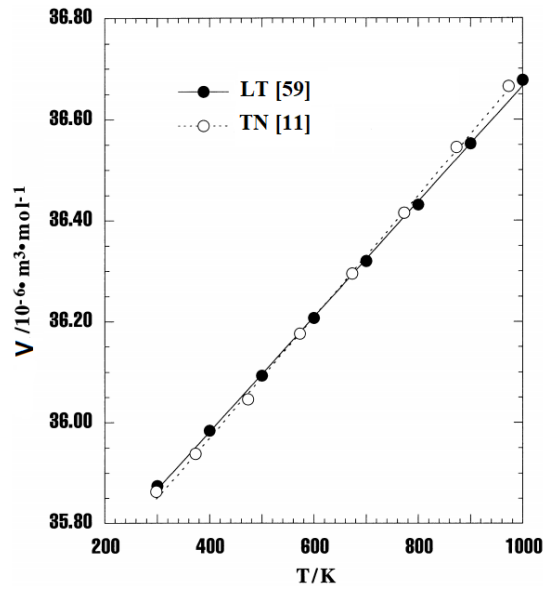
với H là entanpy được xác định bởi

$$H = E + PV. \quad (1.15)$$

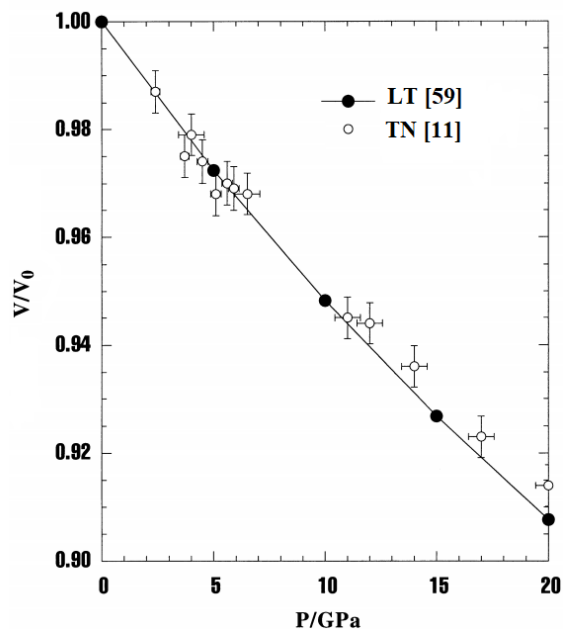
Từ những kết quả trên, phương pháp động lực học phân tử là một phương pháp được sử dụng cho nghiên cứu tính chất nhiệt động của vật liệu.

Năm 1998, T.Katsumata và cộng sự đã áp dụng phương pháp động lực học phân tử cho perovskite SrTiO_3 và thu được sự phụ thuộc nhiệt độ của tham số mạng phù hợp với kết quả thực nghiệm như được chỉ ra trong Hình 1.7 [46].

Sự phụ thuộc áp suất của thể tích cũng cho kết quả phù hợp thực nghiệm được chỉ ra trong Hình 1.8.



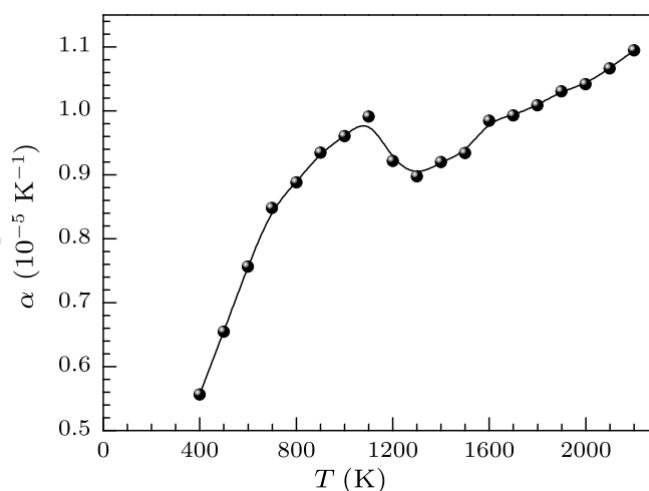
Hình 1.7. Sự thay đổi thể tích của SrTiO₃ với nhiệt độ từ kết quả tính toán động lực học phân tử [59] và thực nghiệm [11].



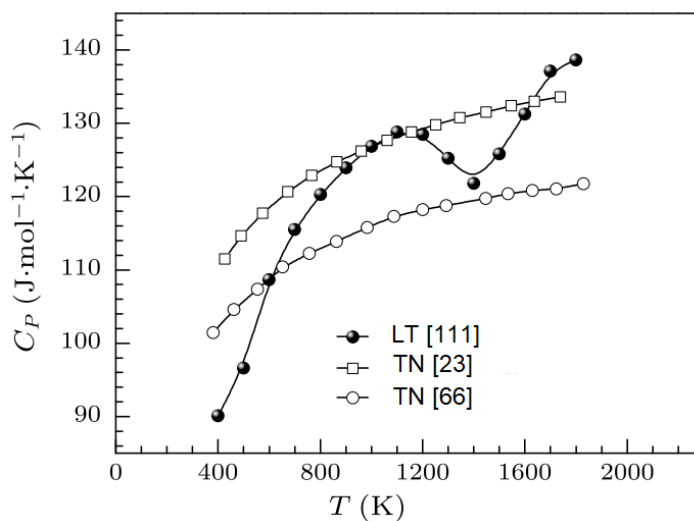
Hình 1.8. Sự thay đổi thể tích của SrTiO₃ với áp suất từ kết quả tính toán động lực học phân tử [59] và thực nghiệm [11].

Tuy nhiên, các đại lượng nhiệt động khác chưa được thể hiện trong kết quả nghiên cứu. Tác giả cũng chỉ ra còn một số vấn đề gặp phải khi tính toán các đại lượng nhiệt động khác, đặc biệt ở vùng nhiệt độ cao.

Năm 2010, Seetawan Tosawat cùng cộng sự đã sử dụng phương pháp động lực học phân tử nghiên cứu tính chất nhiệt động của perovskite SrTiO₃ [111]. Nghiên cứu của họ đã chỉ ra thêm các đại lượng nhiệt động khác của SrTiO₃ như chỉ trong Hình 1.9 và Hình 1.10 [111].



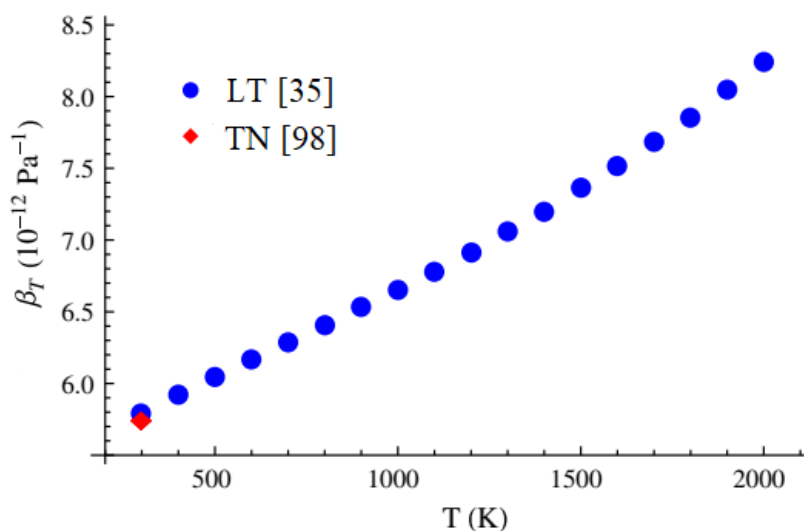
Hình 1.9. Sự phụ thuộc nhiệt độ của hệ số nở dài của SrTiO₃ từ kết quả tính toán động lực học phân tử [111].



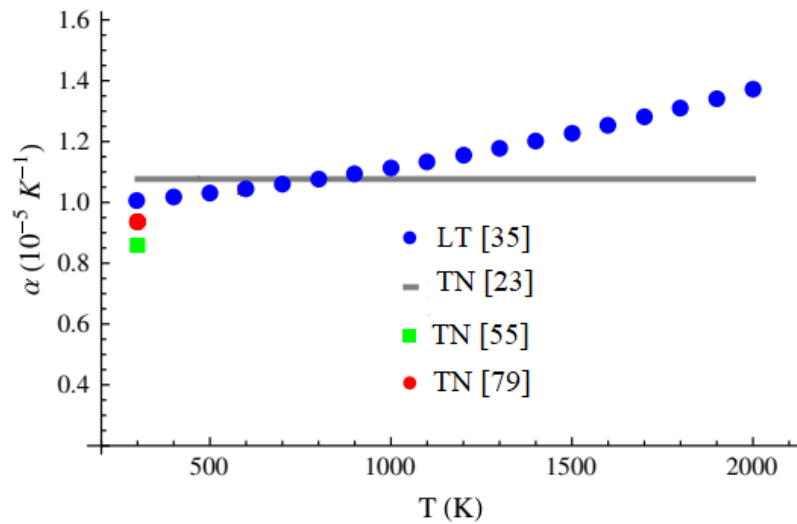
Hình 1.10. Sự phụ thuộc nhiệt độ của nhiệt dung đẳng áp của SrTiO₃ từ kết quả tính toán động lực học phân tử [111] và kết quả thực nghiệm của de Ligny [23], Coughlin [66].

Từ đồ thị Hình 1.10 cho thấy kết quả tính toán động lực học phân tử của Seetawan sai lệch đáng kể so với thực nghiệm.

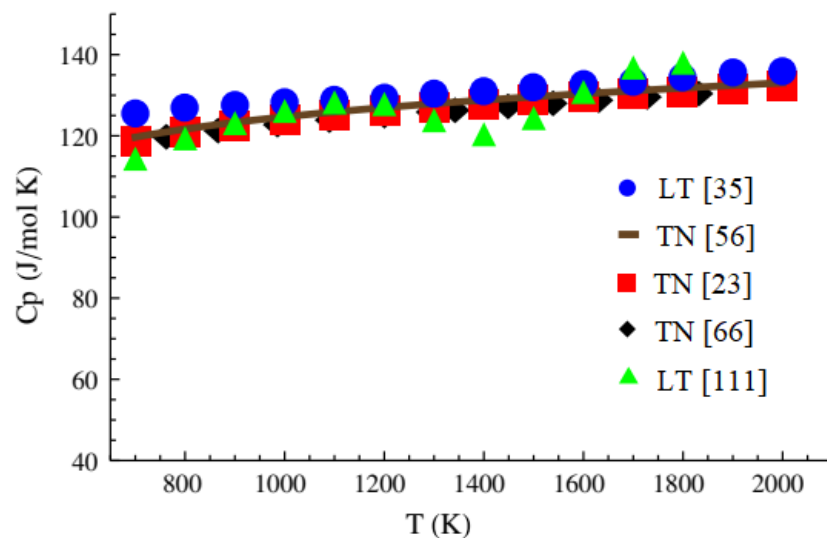
Năm 2012, khi đánh giá kết quả tính toán tính chất nhiệt động của perovskite SrTiO₃, Wen Fong Goh cùng cộng sự cũng đã chỉ ra một số hạn chế của tính toán động lực học phân tử của Seetawan Tosawat. Goh và cộng sự không thể tính lại được các kết quả của Seetawan Tosawat bằng phương pháp động lực học phân tử [35]. Sau đó, Goh cùng cộng sự lại tiếp tục sử dụng phương pháp động lực học để nghiên cứu tính chất nhiệt động của perovskite SrTiO₃. Họ đã chỉ ra kết quả một số đại lượng nhiệt động phù hợp với thực nghiệm như được chỉ ra trong các Hình 1.11- 1.13 [35].



Hình 1.11. Hệ số nén đẳng nhiệt của SrTiO₃ ở các nhiệt độ khác nhau thu được từ tính toán động lực học phân tử [35] và thực nghiệm [98].



Hình 1.12. Hệ số nở dài của SrTiO₃ ở nhiệt độ khác nhau thu được từ kết quả tính toán động lực học phân tử [35] và một số kết quả thực nghiệm [23], [55], [79].



Hình 1.13. Nhiệt dung đẳng áp của SrTiO₃ là hàm số của nhiệt độ thu được từ tính toán động lực học phân tử [35] và kết quả thực nghiệm [23], [56], [66] và kết quả tính toán Seetawan [111].

Tuy nhiên, ở vùng nhiệt độ cao, kết quả tính toán hệ số nở dài có sự sai lệch nhiều hơn so với thực nghiệm Hơn nữa, trong sự so sánh chi tiết hơn,

đường cong nhiệt dung đẳng áp cũng có xu hướng lệch xa hơn đường cong thực nghiệm.

Như vậy phương pháp động lực học phân tử đã được áp dụng nghiên cứu tính chất nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite SrTiO_3 , kết quả tính toán các đại lượng nhiệt động của vật liệu có sự phù hợp phần nào với thực nghiệm trong một số vùng nhiệt độ và áp suất. Tuy nhiên, ba lần áp dụng phương pháp động lực học phân tử vào nghiên cứu cùng một vật liệu perovskite SrTiO_3 lại đưa ra các kết quả có sự sai khác. Thêm vào đó, trong các nghiên cứu động lực học về tính chất nhiệt động của perovskite, như SrTiO_3 , chưa thể hiện đầy đủ và rõ ràng ảnh hưởng hiệu ứng phi điều hòa của dao động mạng tinh thể lên tính chất nhiệt động của vật liệu được nghiên cứu.

1.2.2. Tổng quan về phương pháp ab initio

Cơ học lượng tử cùng với các định luật và phương trình cơ bản của nó có thể giúp chúng ta có những hiểu biết hoặc có thể điều khiển trạng thái của electron, nguyên tử, phân tử và tính chất vật liệu. Các phương pháp tính toán dựa trên cơ học lượng tử mà không sử dụng bất kì tham số nào từ dữ liệu thực nghiệm, được gọi tên là phương pháp ab initio hoặc phương pháp tính toán từ nguyên lí đầu tiên (tên trong tiếng anh là first principle method hoặc ab initio method) [70]. Phương pháp ab initio chỉ duy nhất dựa trên các định luật cơ bản của vật lí, thông tin mà phương pháp cần có thể chỉ là các số nguyên tử của các nguyên tử cấu tạo nên vật liệu.

Ban đầu, phương pháp ab initio cùng lí thuyết phiếm hàm mật độ tập trung nghiên cứu vật liệu ở trạng thái cơ bản ứng với cực tiểu của năng lượng tương ứng trạng thái $T = 0\text{K}$ [61], [62]. Sau đó, phương pháp tiếp tục được phát triển qua các phần mềm mô phỏng được nhiều nhà khoa học biết đến và sử dụng như là Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) [27], Quantum

Espresso [33]. Cùng sự phát triển áp dụng của lí thuyết phiên hàm mật độ kết hợp các phương pháp và kết quả vật lí khác, phương pháp ab initio đã giải quyết bài toán cho nhiệt độ cao, nghiên cứu tính chất nhiệt động của vật liệu perovskite ở nhiệt độ và áp suất khác nhau [10], [78], [20].

Một số nhóm nghiên cứu như A. Boudali và cộng sự [10], Yanli Lu và cộng sự [78] đã sử dụng phương pháp ab initio nghiên cứu tính chất nhiệt động của perovskite SrTiO₃. Trong các nghiên cứu đó, nhiệt dung C_v của SrTiO₃ được xác định từ mô hình Debye giả điều hòa bởi biểu thức sau [7]:

$$C_v = 3nk_B \left[4D \left(\frac{\theta_D}{T} \right) - \frac{3\theta_D/T}{e^{\theta_D/T} - 1} \right], \quad (1.16)$$

trong đó, n là số nguyên tử; D là tích phân Debye và θ_D có biểu thức dạng :

$$\theta_D = \frac{\hbar}{k_B} \cdot (6\pi^2 V^{1/2} n)^{1/3} f(\sigma) \sqrt{\frac{B_s}{M}}. \quad (1.17)$$

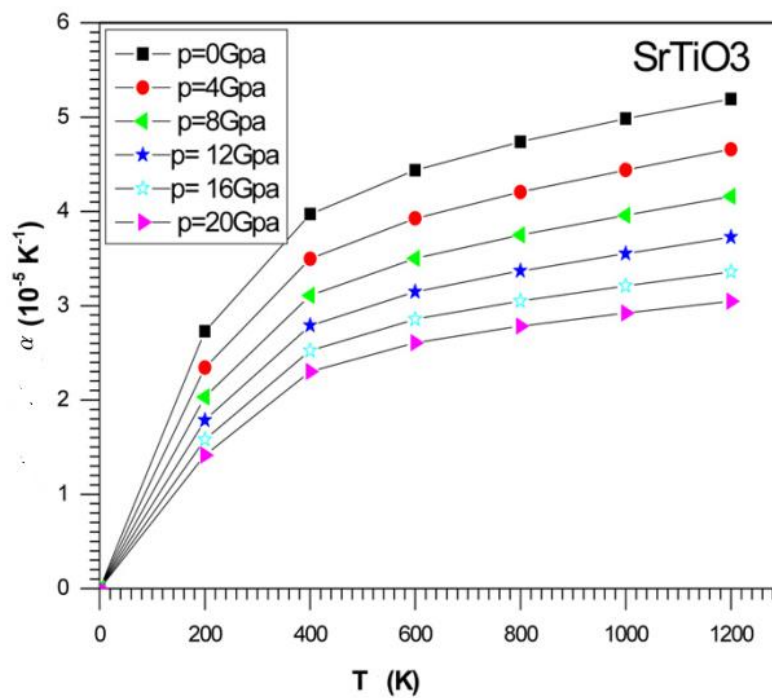
Trong biểu thức (1.17), M là khối lượng phân tử cho mỗi ô cơ sở, B_s là mô đun khối đoạn nhiệt và V là thể tích.

Hệ số dẫn nở vì nhiệt α_T của SrTiO₃ được xác định bởi biểu thức sau:

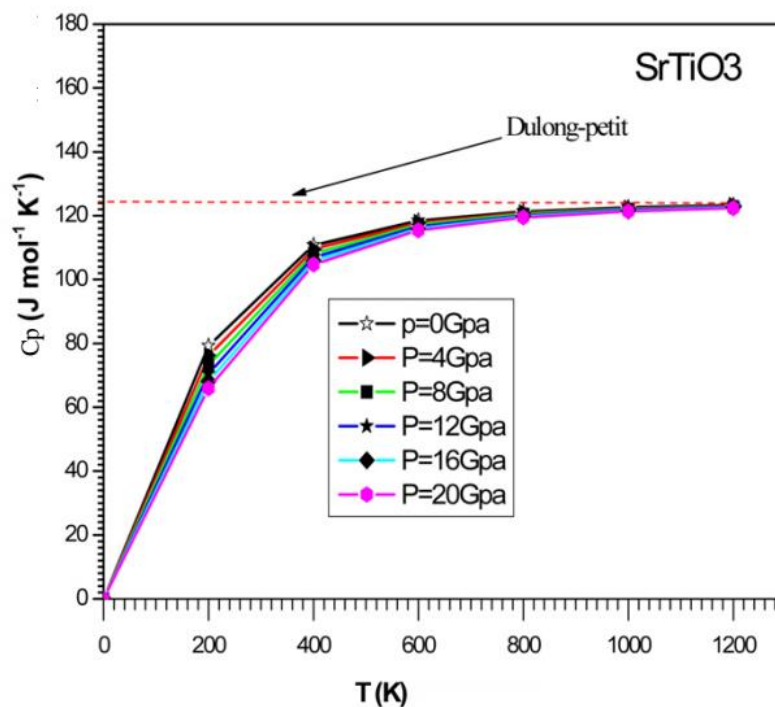
$$\alpha_T = \frac{\gamma C_v}{B_T V}. \quad (1.18)$$

Trong biểu thức (1.18), γ là hệ số Gruneisen; B_T mô đun khối đẳng nhiệt.

A. Boudali và cộng sự đã thu được kết quả nghiên cứu tính chất nhiệt động của perovskite SrTiO₃ ở các nhiệt độ và áp suất khác nhau thể hiện như trong Hình 1.14 -15 [10].



Hình 1.14. Kết quả tính toán của A.Boudali [10] về sự phụ thuộc nhiệt độ của hệ số dẫn nở vì nhiệt của SrTiO₃ ở các áp suất 0, 4, 8, 12, 16 và 20 GPa.



Hình 1.15. Kết quả tính toán của A.Boudali [10] về sự phụ thuộc nhiệt độ của nhiệt dung của SrTiO₃ ở các áp suất 0, 4, 8, 12, 16 và 20 GPa.

Trong các nghiên cứu tính chất nhiệt động của perovskite SrTiO₃ bằng phương pháp ab initio trên, đều sử dụng mô hình Debye giả điều hòa. Kết quả không chỉ rõ sự so sánh với thực nghiệm. Kết quả tính toán bằng ab initio chỉ ra có sự sai lệch đáng kể với thực nghiệm như trong Hình 1.14-15 [23].

Như vậy, phương pháp ab initio đã được áp dụng để đưa ra các giá trị đại lượng nhiệt động của perovskite, như SrTiO₃, trong các vùng nhiệt độ và áp suất khác nhau. Tuy vậy, trong các nghiên cứu bằng ab initio đã thực hiện đều sử dụng mô hình giả điều hòa để xác định các đại lượng nhiệt động của vật liệu perovskite. Điều đó cho thấy trong nghiên cứu bằng phương pháp ab initio cho vật liệu perovskite cũng chưa tính đến được đầy đủ, rõ ràng ảnh hưởng của hiệu ứng phi điều hòa trong dao động mạng tính thể lên tính chất nhiệt động của vật liệu perovskite.

1.3. Tổng quan về phương pháp thống kê mô men

1.3.1. Công thức tổng quát về mô men

Định nghĩa về mô men đã được đưa ra trong lý thuyết xác suất và trong vật lý thống kê. Giả sử có một tập các biến cố ngẫu nhiên q_1, q_2, \dots, q_n tuân theo quy luật thống kê, được mô tả bởi hàm phân bố $\omega(q_1, q_2, \dots, q_n)$, hàm này thoả mãn điều kiện chuẩn hóa. Mô men cấp m được định nghĩa như sau:

$$\langle q_1^m \rangle = \int \int_{(q_1, q_2, \dots, q_n)} q_1^m \omega(q_1, q_2, \dots, q_n) dq_1 \dots dq_n, \quad (1.19)$$

mô men này có khi còn được gọi là mô men gốc.

Ngoài ra còn có định nghĩa mô men trung tâm cấp m :

$$\langle (q_1 - \langle q_1 \rangle)^m \rangle = \int \int_{q_1, q_2, \dots, q_n} (q_1 - \langle q_1 \rangle)^m \omega(q_1, q_2, \dots, q_n) dq_1, \dots, dq_n. \quad (1.20)$$

Như vậy, đại lượng trung bình thống kê $\langle q \rangle$ chính là mô men cấp một, còn phương sai $\langle (q_1 - \langle q_1 \rangle)^2 \rangle$ chính là mô men trung tâm cấp hai. Từ các định nghĩa

trên chúng ta thấy rằng, về nguyên tắc nếu biết hàm phân bố $\omega(q_1, q_2, \dots, q_n)$ thì hoàn toàn có thể xác định được các mô men.

Trong vật lí thống kê cũng có các định nghĩa tương tự. Riêng đối với hệ lượng tử, được mô tả bởi toán tử thống kê $\hat{\rho}$, các mô men xác định như sau:

$$\begin{cases} \langle \hat{q}^m \rangle = \text{tr}(\hat{q}^m \hat{\rho}) \\ \langle (\hat{q} - \langle \hat{q} \rangle)^m \rangle = \text{Tr} \left\{ (\hat{q} - \langle \hat{q} \rangle)^m \hat{\rho} \right\}. \end{cases} \quad (1.21)$$

Toán tử $\hat{\rho}$ tuân theo phương trình Liouville lượng tử:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}], \quad (1.22)$$

trong đó $[\dots, \dots]$ là dấu ngoặc Poisson lượng tử.

Từ (1.21) cho thấy, nếu biết toán tử thống kê $\hat{\rho}$ thì có thể tìm được mô men. Với hệ cân bằng nhiệt động, dạng của $\hat{\rho}$ thường đã biết (phân bố chính tắc, hoặc chính tắc lớn,...), nhưng với mô men bậc cao việc tìm các mô men theo (1.21) cũng trở nên phức tạp. Một giải pháp đơn giản hơn đã thực hiện là xây dựng các hệ thức biểu diễn mối quan hệ giữa các mô men, mô men cấp cao có thể tính toán qua mô men cấp thấp hơn [115].

Xét một hệ lượng tử, chịu tác động của các lực không đổi a_i theo hướng tọa độ suy rộng Q_i . Như vậy Hamiltonian của hệ có dạng:

$$\hat{H} = \hat{H}_o - \sum_i a_i \hat{Q}_i, \quad (1.23)$$

với \hat{H}_o là Hamiltonian của hệ khi không có ngoại lực tác dụng.

Dưới tác dụng của ngoại lực không đổi, hệ chuyển sang trạng thái cân bằng nhiệt động mới, được mô tả bởi phân bố chính tắc:

$$\hat{\rho} = \text{Exp} \left[\frac{\psi - \hat{H}}{\theta} \right], \quad \theta = k_B T, \quad (1.24)$$

trong đó ψ là năng lượng tự do của hệ ; k_B là hằng số Boltzmann.

Bây giờ chúng ta thực hiện đạo hàm theo a_k đối với điều kiện chuẩn của toán tử thống kê :

$$\text{Tr}\hat{\rho} = 1. \quad (1.25)$$

Muốn vậy chúng ta hãy sử dụng các công thức toán tử [117]:

$$\frac{\partial \hat{A}_\lambda}{\partial \lambda} = \left\{ \tau \hat{b} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\tau^{n+1}}{(n+1)!} [\hat{c} + \lambda \hat{b} [\hat{c} + \lambda \hat{b} \dots [\hat{c} + \lambda \hat{b}, \hat{b}] \dots]] \right\} \hat{A}_\lambda(\tau), \quad (1.26)$$

$$\frac{\partial \hat{A}_\lambda}{\partial \lambda} = \hat{A}_\lambda(\tau) \left\{ \tau \hat{b} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\tau)^{n+1}}{(n+1)!} [\hat{c} + \lambda \hat{b} [\hat{c} + \lambda \hat{b} \dots [\hat{c} + \lambda \hat{b}, \hat{b}] \dots]] \right\}, \quad (1.27)$$

trong đó $\hat{A}_\lambda(\tau) = \exp[\tau(\hat{c} + \lambda \hat{b})]$; \hat{b} , \hat{c} là các toán tử tùy ý ; λ và τ là các thông số.

Chúng ta rút ra được biểu thức:

$$\frac{1}{\theta} \frac{\partial \psi}{\partial a_k} + \frac{1}{\theta} \left[\langle \hat{Q}_k \rangle_a + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n+1)!} \left(\frac{i\hbar}{\theta} \right)^n \langle \hat{Q}_k^{(n)} \rangle_a \right] = 0, \quad (1.28)$$

với $\langle \dots \rangle_a$ biểu thị trung bình theo $\hat{\rho} = \text{Exp} \left\{ \frac{\psi - \hat{H}_0 + \sum_K a_K \hat{Q}_K}{\theta} \right\}$ và :

$$\hat{Q}_k^{(n)} \equiv \frac{1}{(i\hbar)^n} [\dots [\hat{Q}, \hat{H}] \dots \hat{H}]. \quad (1.29)$$

Đối với hệ cân bằng nhiệt động ta có: $[\hat{H}, \hat{\rho}] = 0$ và do đó $\langle \hat{Q}_k^{(n)} \rangle_a = 0$. Chúng ta thu được hệ thức :

$$\langle \hat{Q}_k \rangle_a = - \frac{\partial \psi}{\partial a_k}. \quad (1.30)$$

Công thức (1.30) cho phép tính năng lượng tự do của hệ lượng tử khi có ngoại lực tác dụng.

Bây giờ, lấy đạo hàm biểu thức của giá trị trung bình đối với đại lượng F tùy ý theo a_k :

$$\langle F \rangle_a = Tr(\hat{F}\hat{\rho}). \quad (1.31)$$

Khi sử dụng (1.30) và bằng một số phép biến đổi trong [117] đã tìm được hệ thức tổng quát, chính xác :

$$\frac{1}{2} \langle [\hat{F}, \hat{Q}_k]_+ \rangle_a - \langle \hat{F} \rangle_a \langle \hat{Q}_k \rangle_a = \theta \frac{\partial \langle \hat{F} \rangle_a}{\partial a_k} - \theta \sum_{m=0}^{\infty} \frac{B_{2m}}{(2m)!} \left(\frac{i\hbar}{\theta} \right)^{2m} \left\langle \frac{\partial \hat{F}^{(2m)}}{\partial a_k} \right\rangle_a, \quad (1.32)$$

trong đó B_{2m} là hệ số Bernouli.

Hệ thức này cho phép xác định sự tương quan giữa đại lượng F và tọa độ Q_k .

Muốn vậy cần phải biết các đại lượng $\langle \hat{F} \rangle_a$ và $\left\langle \frac{\partial \hat{F}^{(2m)}}{\partial a_k} \right\rangle_a$. Đại lượng $\langle \hat{F} \rangle_a$ có

thể được xác định từ điều kiện cân bằng của hệ, còn $\left\langle \frac{\partial \hat{F}^{(2m)}}{\partial a_k} \right\rangle_a$ có thể được xác

định từ các phương trình động lực.

Trường hợp đặc biệt $\hat{F} = \hat{Q}_k$, ta có biểu thức chính xác đối với phương sai:

$$\langle (\hat{Q}_k - \langle \hat{Q}_k \rangle_a)^2 \rangle = \theta \frac{\partial \langle \hat{Q}_k \rangle_a}{\partial a_k} - \theta \sum_{m=0}^{\infty} \frac{B_{2m}}{(2m)!} \left(\frac{i\hbar}{\theta} \right)^{2m} \left\langle \frac{\partial \hat{Q}^{(2m)}}{\partial a_k} \right\rangle_a. \quad (1.33)$$

Chú ý rằng Q_k không phụ thuộc rõ ràng vào a_k , nên đối với hệ cổ điển, công thức (1.23) trở nên đơn giản:

$$\langle (\hat{Q}_k - \langle \hat{Q}_k \rangle_a)^2 \rangle = \theta \frac{\partial \langle \hat{Q}_k \rangle_a}{\partial a_k}. \quad (1.34)$$

Công thức (1.34) là một công thức quen thuộc trong cơ học thống kê cổ điển [26].

Ngoài ra công thức (1.32) còn cho phép xác định hàm tương quan giữa \hat{F} và \hat{Q}_K đối với hệ với Hamiltonian \hat{H}_0 :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \langle [\hat{F}, \hat{Q}_k]_+ \rangle - \langle \hat{F} \rangle \langle \hat{Q}_k \rangle = \\ & = \theta \left[\frac{\partial \langle \hat{F} \rangle_a}{\partial a_K} \right]_{a=0} - \sum_{m=0}^{\infty} \frac{B_{2m}}{(2m)!} \left(\frac{i\hbar}{\theta} \right)^{2m} \left[\left\langle \frac{\partial \hat{F}^{(m)}}{\partial a_K} \right\rangle \right]_{a=0}, \end{aligned} \quad (1.35)$$

trong đó $\langle \dots \rangle$ biểu thị trung bình theo tập hợp cân bằng với Hamiltonian \hat{H}_0 .

Công thức (1.35) có thể viết ở dạng khác [44]:

$$\frac{1}{2} \langle [\hat{F}, \hat{Q}_k^{(n)}]_+ \rangle_a = (-1)^{n+1} \theta \sum_{m=0}^{\infty} \frac{B_{2m}}{(2m)!} \left(\frac{i\hbar}{\theta} \right)^{2m} \left\langle \frac{\partial \hat{F}^{(2m+n)}}{\partial a_k} \right\rangle_a. \quad (1.36)$$

Trường hợp đặc biệt $\hat{F} = \hat{Q}$ chúng ta thu được hệ thức cho phép xác định thăng giáng của xung lượng:

$$\langle \hat{Q}_k^2 \rangle = \theta \sum_{m=0}^{\infty} \frac{B_{2m}}{(2m)!} \left(\frac{i\hbar}{\theta} \right)^{2m} \left\langle \frac{\partial \hat{Q}_k^{(2m+1)}}{\partial a_k} \right\rangle_a. \quad (1.37)$$

Công thức (1.32) còn được sử dụng để viết công thức truy chứng đối với mô men tương quan cấp cao [115]. Muốn vậy, công trình [115] đã đưa vào định nghĩa toán tử tương quan cấp n như sau:

$$\hat{K}_n = \frac{1}{2^{n-1}} [\dots [\hat{Q}_1, \hat{Q}_2]_+ \hat{Q}_3]_+ \dots \hat{Q}_n]_+. \quad (1.38)$$

Nếu trong công thức (1.32) thay $\hat{F} = \hat{K}_n$ và $k = n + 1$ thì thu được công thức truy chứng:

$$\langle \hat{K}_{n+1} \rangle_a = \langle \hat{K}_n \rangle_a \langle \hat{Q}_{n+1} \rangle_a + \theta \frac{\partial \langle \hat{K}_n \rangle_a}{\partial a_{n+1}} - \theta \sum_{m=0}^{\infty} \frac{B_{2m}}{(2m)!} \left(\frac{i\hbar}{\theta} \right)^{2m} \left\langle \frac{\partial \hat{K}_n^{(2m)}}{\partial a_{n+1}} \right\rangle_a. \quad (1.39)$$

Công thức này là một công thức tổng quát của mô men [115]. Về nguyên tắc, công thức (1.39) cho phép xác định các mô men cấp tùy ý. Đó là công thức xác định liên hệ mô men cấp cao qua mô men cấp thấp hơn. Nó có thể biểu diễn mô men cấp cao qua mô men cấp một và khi đó chúng ta thu được biểu thức khá cồng kềnh, phức tạp. Với các hệ cụ thể, chúng ta có thể tìm dạng đơn giản, gọn gàng hơn.

Trong vật lý thống kê, năng lượng tự do liên hệ với tổng trạng thái bởi biểu thức:

$$\begin{cases} \psi = -\theta \ln Z \\ Z = \text{Tr} \left(e^{-\frac{H}{\theta}} \right). \end{cases} \quad (1.40)$$

Tuy nhiên, việc tìm ψ không đơn giản. Thông thường, đối với các hệ lý tưởng có thể tìm được biểu thức chính xác của năng lượng tự do. Với hệ phức tạp, ta có thể tìm được nó dưới dạng gần đúng.

Giả sử Hamiltonian của hệ lượng tử có thể biểu diễn ở dạng:

$$\hat{H} = \hat{H}_o - \alpha \hat{V}, \quad (1.41)$$

với α là thông số đặc trưng cho dao động phi điều hòa của mạng, \hat{V} là toán tử tùy ý.

Tương tự như (1.30), chúng ta thu được biểu thức:

$$\langle V \rangle_\alpha = -\frac{\partial \psi(\alpha)}{\partial \alpha}. \quad (1.42)$$

Biểu thức này tương đương với công thức:

$$\psi(\alpha) = \psi_0 - \int_0^\alpha \langle V \rangle_\alpha d\alpha', \quad (1.43)$$

trong đó ψ_0 là năng lượng tự do của hệ với Hamiltonian \hat{H}_0 và được xem như đã biết.

Khi tìm được $\langle V \rangle_\alpha$ (có thể sử dụng các công thức mô men) thì từ (1.43) có thể thu được biểu thức đối với năng lượng tự do $\psi(\alpha)$. Nếu Hamiltonian \hat{H} có dạng phức tạp thì có thể phân tích dưới dạng:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \sum_i \alpha_i \hat{V}_i, \quad (1.44)$$

sao cho $\hat{H}_0 - \alpha_1 \hat{V}_1 \gg \alpha_2 \hat{V}_2, \dots$

Giả sử biết năng lượng tự do ψ_0 ứng với Hamiltonian \hat{H}_0 của hệ, khi đó tìm năng lượng tự do ψ_1 ứng $\hat{H}_1 = \hat{H}_0 - \alpha_1 \hat{V}_1$. Sau đó tìm năng lượng tự do ψ_2 ứng $\hat{H}_2 = \hat{H}_1 - \alpha_2 \hat{V}_2 \dots$. Bằng cách tính lần lượt như vậy, chúng ta sẽ thu được biểu thức đối với năng lượng tự do ψ của hệ.

Khi biết năng lượng tự do của hệ sẽ cho phép xác định được các đại lượng nhiệt động khác và khảo sát sự phụ thuộc của các đại lượng nhiệt động vào nhiệt độ và áp suất.

1.3.2. Tổng quan kết quả nghiên cứu tính chất nhiệt động của vật liệu bằng phương pháp thống kê mô men.

Được đề xuất trong bài báo khoa học vào năm 1988, phương pháp thống kê mô men đã được áp dụng nghiên cứu tính chất nhiệt động của kim loại cấu trúc lập phương thu được các biểu thức giải tích cho các đại lượng nhiệt động có kể đến hiệu ứng của dao động phi điều hòa trong gần đúng mô men bậc 4 của độ dời của nguyên tử khỏi vị trí cân bằng [82], [115]. Từ biểu thức giải tích đó, các kết quả tính toán bằng phương pháp thống kê mô men cho các đại lượng

nhiệt động đối với kim loại cấu trúc lập phương tâm diện và tâm khối phù hợp tốt với thực nghiệm và tính toán khác trong vùng khác nhau của nhiệt độ và áp suất [82], [95], [44].

Tiếp sau đó cho đến nay, phương pháp thống kê mô men đã được sử dụng, phát triển thành công trong nghiên cứu các tính chất nhiệt động của tinh thể hợp kim hai thành phần cấu trúc lập phương [83], tinh thể khí trơ rắn cấu trúc lập phương [92], kim loại cấu trúc lục giác [121], bán dẫn cấu trúc kim cương [47], cấu trúc siêu mạng kim loại [48], oxit cấu trúc Fluorit [46], ... cho kết quả phù hợp tốt với thực nghiệm khi tính đến ảnh hưởng phi điều hòa của dao động mạng tinh thể.

Kể đến hiệu ứng phi điều hòa trong gần đúng lũy thừa bậc bốn của độ dời của nguyên tử khỏi vị trí cân bằng, phương pháp thống kê mô men cũng đã nghiên cứu thành công tính chất nhiệt động hợp kim ba thành phần cấu trúc lập phương tâm diện và tâm khối ở các vùng nhiệt độ và áp suất khác nhau [91].

Sự hiệu quả đó của phương pháp thống kê mô men trong nghiên cứu tính chất nhiệt động của nhiều kiểu vật liệu với nhiều cấu trúc khác nhau sẽ tiếp tục định hướng áp dụng nghiên cứu tính chất nhiệt động của vật liệu mới với cấu trúc mới trong các vùng nhiệt độ và áp suất khác nhau. Tuy nhiên, tính đến trước nghiên cứu của luận án này thì phương pháp thống kê mô men chưa được áp dụng để nghiên cứu tính chất nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite.

Kết luận chương 1

Vật liệu cấu trúc perovskite với đặc thù cấu trúc cùng nhiều tính chất đặc biệt, thú vị đã, đang và tiếp tục là vật liệu thu hút sự quan tâm nghiên cứu của nhiều nhà khoa học, cũng như được ứng dụng trong nhiều lĩnh vực của khoa học và công nghệ.

Trong một số phương pháp nghiên cứu lí thuyết về tính chất nhiệt động của vật liệu perovskite như phương pháp động lực học phân tử, phương pháp ab initio đã cho kết quả trong một số vùng nhiệt độ và áp suất nhất định. Một số nghiên cứu áp dụng phương pháp ab initio đã sử dụng mô hình giả điều hòa Debye để tính toán đại lượng nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite như SrTiO_3 . Các lần sử dụng phương pháp động lực học phân tử cho kết quả khác nhau khi lặp lại tính toán trên cùng loại vật liệu perovskite như SrTiO_3 . Có thể một số nghiên cứu bằng mô phỏng động lực học phân tử đó đã chưa sử dụng thế năng tương tác hoặc tham số thế phù hợp cho nghiên cứu tính chất nhiệt động của vật liệu perovskite như SrTiO_3 . Thêm vào đó, một số nghiên cứu sử dụng hai phương pháp nghiên cứu lí thuyết trên đều chưa thể hiện rõ và đầy đủ ảnh hưởng của dao động phi điều hòa trong mạng tinh thể lên tính chất nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite.

Phương pháp thống kê mô men đã cho thấy sự thành công, hiệu quả và phù hợp trong nghiên cứu tính chất nhiệt động của nhiều kiểu vật liệu với nhiều cấu trúc khác nhau có kể đến hiệu ứng phi điều hòa của mạng tinh thể.

Trên cơ sở tổng quan, trong nghiên cứu của luận án này, phương pháp thống kê mô men sẽ được áp dụng để nghiên cứu tính chất nhiệt động của vật liệu perovskite có kể đến hiệu ứng phi điều hòa trong dao động mạng tinh thể vật liệu với tên đề tài là “*Nghiên cứu tính chất nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite bằng phương pháp thống kê mô men*”.

CHƯƠNG 2. NGHIÊN CỨU TÍNH CHẤT NHIỆT ĐỘNG CỦA VẬT LIỆU CẤU TRÚC PEROVSKITE Ở ÁP SUẤT $P = 0$ GPa BẰNG PHƯƠNG PHÁP THỐNG KÊ MÔ MEN

Sử dụng các kết quả của phương pháp mô men, chúng tôi xây dựng các biểu thức giải tích của đại lượng nhiệt động của vật liệu perovskite cấu trúc tinh thể lập phương có kể đến hiệu ứng dao động phi điều hòa trong gần đúng lũy thừa bậc bốn của độ dời của nguyên tử khỏi vị trí cân bằng nút mạng. Các biểu thức đó giúp tính số đại lượng nhiệt động của vật liệu tại các nhiệt độ và áp suất $P = 0$ GPa. Lựa chọn và tối ưu tham số thể phù hợp cho các loại tương tác trong vật liệu perovskite SrTiO_3 và BaTiO_3 , chúng tôi tính số các đại lượng nhiệt động của các vật liệu đó. Kết quả thu được được phân tích và so sánh với các kết quả nghiên cứu lý thuyết và thực nghiệm khác. Từ kết quả thu được chúng tôi đưa ra các kết luận về phương pháp nghiên cứu và tính chất nhiệt động của vật liệu perovskite ở áp suất $P = 0$ GPa.

Kết quả chính của chương được công bố trên tạp chí *Materials Today Communications* năm 2022 (là tạp chí thuộc danh mục *Web of Science* có chỉ số $\text{IF} = 3.662$ và *Scopus (Q2)*), Tạp chí Toán Lý *VNU Journal of Science: Mathematics – Physics* năm 2022 và trình bày trong báo cáo tại Hội nghị Vật lý Việt Nam lần thứ 46 (2021) và 47 (2022).

2.1. Độ dời của nguyên tử khỏi nút mạng

Xét vật liệu perovskite ABX_3 có cấu trúc tinh thể với sự sắp xếp tuần hoàn trong mạng tinh thể của các nguyên tử A, nguyên tử B và nguyên tử X. Trong ô cơ sở của mạng tinh thể vật liệu perovskite cấu trúc lập phương có 5 nguyên tử, trong đó có 1 nguyên tử A, 1 nguyên tử B và 3 nguyên tử X. Tương tác đóng góp chủ yếu giữa các nguyên tử trong tinh thể là tương tác cặp, phụ thuộc khoảng cách tương đối giữa hai nguyên tử (hạt). Khi đó thế năng tương

tác của hệ N hạt (nguyên tử) được xác định qua tổng các thế năng tương tác cặp giữa hai hạt dưới dạng:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i,j}^N \varphi_{ij}(|\vec{r}_{ij}|), \quad (2.1)$$

trong đó: φ_{ij} là thế năng tương tác giữa hạt thứ i và hạt thứ j và \vec{r}_{ij} xác định vị trí tương đối giữa hạt thứ i và hạt thứ j.

Trong hệ tinh thể cấu trúc lập phương của vật liệu perovskite với N ô cơ sở, sử dụng phương pháp quả cầu phối vị tính cho hệ 5N hạt, thế năng tương tác (2.1) có thể viết dưới dạng:

$$U^p = \frac{N^A}{2} \sum_i \varphi_{i0}^A(|\vec{a}_i + \vec{u}_i|) + \frac{N^B}{2} \sum_i \varphi_{i0}^B(|\vec{a}_i + \vec{u}_i|) + \frac{N^X}{2} \sum_i \varphi_{i0}^X(|\vec{a}_i + \vec{u}_i|). \quad (2.2)$$

Trong đó: \vec{u}_i là độ dời của hạt thứ i, \vec{a}_i là vị trí cân bằng của hạt thứ i, φ_{i0}^b (b = A, B, X) là thế năng tương tác giữa hạt b thứ 0 (được chọn làm gốc) và hạt thứ i. Trong N ô cơ sở có số nguyên tử của các nguyên tử A, B và X tương ứng sẽ là $N^A = N, N^B = N$ và $N^X = 3N$.

Khai triển Taylor thế tương tác $\varphi_{i0}^b(|\vec{a}_i + \vec{u}_i|)$ theo độ dời nhỏ của các hạt quanh vị trí cân bằng của nó, ta được:

$$\begin{aligned} \varphi_{i0}^b(|\vec{a}_i + \vec{u}_i|) &= \varphi_{i0}^b(|\vec{a}_i|) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \left(\frac{\partial^2 \varphi_{i0}^b}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta}} \right)_{eq} u_{i\alpha} u_{i\beta} + \frac{1}{6} \sum_{\alpha,\beta,\gamma} \left(\frac{\partial^3 \varphi_{i0}^b}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma}} \right)_{eq} u_{i\alpha} u_{i\beta} u_{i\gamma} \\ &+ \frac{1}{24} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\eta} \left(\frac{\partial^4 \varphi_{i0}^b}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma} \partial u_{i\eta}} \right)_{eq} u_{i\alpha} u_{i\beta} u_{i\gamma} u_{i\eta} + \dots \end{aligned} \quad (2.3)$$

với $\alpha, \beta, \gamma, \eta = x, y, z$.

Kể đến các đóng góp đáng kể của dao động phi điều hòa trong tinh thể ở vùng nhiệt độ cao thì biểu thức khai triển của thế năng tương tác theo độ dời

phải kể đến số hạng bậc cao hơn 2. Trong gần đúng cấp 4, thế năng tương tác giữa hạt thứ i và hạt 0 có dạng:

$$\begin{aligned} \varphi_{i0}^b(|\vec{a}_i + \vec{u}_i|) = & \varphi_{i0}^b(|\vec{a}_i|) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \left(\frac{\partial^2 \varphi_{i0}^b}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta}} \right)_{eq} u_{i\alpha} u_{i\beta} + \frac{1}{6} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \left(\frac{\partial^3 \varphi_{i0}^b}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma}} \right)_{eq} u_{i\alpha} u_{i\beta} u_{i\gamma} \\ & + \frac{1}{24} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \eta} \left(\frac{\partial^4 \varphi_{i0}^b}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma} \partial u_{i\eta}} \right)_{eq} u_{i\alpha} u_{i\beta} u_{i\gamma} u_{i\eta}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Các biểu thức đạo hàm bậc cao $\left(\frac{\partial^2 \varphi_{i0}^b}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta}} \right)_{eq}$; $\left(\frac{\partial^3 \varphi_{i0}^b}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma}} \right)_{eq}$;

$\left(\frac{\partial^4 \varphi_{i0}^b}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma} \partial u_{i\eta}} \right)_{eq}$ trong (2.4) có thể biểu diễn qua đạo hàm bậc thấp hơn như

sau [71]:

$$\left(\frac{\partial^2 \varphi_{i0}^b}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta}} \right)_{eq} = (\Theta^2 \varphi_{i0}^b) a_{i\alpha} a_{i\beta} + (\Theta \varphi_{i0}^b) \delta_{\alpha\beta}; \quad (2.5)$$

$$\left(\frac{\partial^3 \varphi_{i0}^b}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma}} \right)_{eq} = (\Theta^3 \varphi_{i0}^b) a_{i\alpha} a_{i\beta} a_{i\gamma} + (\Theta^2 \varphi_{i0}^b) (a_{i\alpha} \delta_{\beta\gamma} + a_{i\beta} \delta_{\alpha\gamma} + a_{i\gamma} \delta_{\alpha\beta}); \quad (2.6)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^4 \varphi_{i0}^b}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma} \partial u_{i\eta}} \right)_{eq} = & (\Theta^4 \varphi_{i0}^b) a_{i\alpha} a_{i\beta} a_{i\gamma} a_{i\eta} \\ & + (\Theta^3 \varphi_{i0}^b) (a_{i\alpha} a_{i\beta} \delta_{\gamma\eta} + a_{i\alpha} a_{i\gamma} \delta_{\beta\eta} + a_{i\alpha} a_{i\eta} \delta_{\beta\gamma} + a_{i\beta} a_{i\gamma} \delta_{\alpha\eta} + a_{i\beta} a_{i\eta} \delta_{\alpha\gamma} + a_{i\gamma} a_{i\eta} \delta_{\alpha\beta}) \\ & + (\Theta^2 \varphi_{i0}^b) (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\eta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\eta} + \delta_{\alpha\eta} \delta_{\beta\gamma}). \end{aligned} \quad (2.7)$$

Trong đó, các đại lượng $\Theta \varphi_{i0}^b$, $\Theta^2 \varphi_{i0}^b$, $\Theta^3 \varphi_{i0}^b$ và $\Theta^4 \varphi_{i0}^b$ được xác định bởi [71]:

$$\Theta \varphi_{i0}^b = \frac{1}{a_i} \varphi_{i0}^{b(1)}(a_i),$$

$$\Theta^2 \varphi_{i0}^b = \frac{1}{a_i^2} \varphi_{i0}^{b(2)}(a_i) - \frac{1}{a_i^3} \varphi_{i0}^{b(1)}(a_i),$$

$$\Theta^3 \varphi_{i0}^b = \frac{1}{a_i^3} \varphi_{i0}^{b(3)}(a_i) - \frac{3}{a_i^4} \varphi_{i0}^{b(2)}(a_i) + \frac{3}{a_i^5} \varphi_{i0}^{b(1)}(a_i),$$

$$\Theta^4 \varphi_{i0}^b = \frac{1}{a_i^4} \varphi_{i0}^{b(4)}(a_i) - \frac{6}{a_i^5} \varphi_{i0}^{b(3)}(a_i) + \frac{15}{a_i^6} \varphi_{i0}^{b(2)}(a_i) - \frac{15}{a_i^7} \varphi_{i0}^{b(1)}(a_i) . \quad (2.8)$$

Các kí hiệu (1), (2), (3), (4) phía trên hàm φ_{i0}^b trong (2.8) là đạo hàm cấp 1, 2, 3, 4 tương ứng của φ_{i0}^b .

Nếu hạt thứ 0 chịu tác dụng bởi lực phụ \bar{a} thì ở trạng thái cân bằng nhiệt động, tổng lực tác dụng lên hạt đó bằng không, ta thu được:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{i,\alpha} \left(\frac{\partial^2 \varphi_{i0}^b}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta}} \right)_{eq} \langle u_{i\alpha} \rangle_a + \frac{1}{4} \sum_{i,\alpha,\gamma} \left(\frac{\partial^3 \varphi_{i0}^b}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma}} \right)_{eq} \langle u_{i\alpha} u_{i\gamma} \rangle_a + \\ & + \frac{1}{12} \sum_{i,\alpha,\gamma,\eta} \left(\frac{\partial^4 \varphi_{i0}^b}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma} \partial u_{i\eta}} \right)_{eq} \langle u_{i\alpha} u_{i\gamma} u_{i\eta} \rangle_a - a_\beta = 0. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Do tính chất đối xứng trong mạng tinh thể lập phương, các số hạng sau bị triệt tiêu:

$$\begin{aligned} \sum_i \left(\frac{\partial^2 \varphi_{i0}^b}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta}} \right)_{eq} &= 0; & \sum_i \left(\frac{\partial^3 \varphi_{i0}^b}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma}} \right)_{eq} &= 0; \\ \sum_i \left(\frac{\partial^4 \varphi_{i0}^b}{\partial u_{i\alpha}^3 \partial u_{i\beta}} \right)_{eq} &= 0 \quad \text{và} \quad \sum_i \left(\frac{\partial^4 \varphi_{i0}^b}{\partial u_{i\alpha}^2 \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma}} \right)_{eq} &= 0. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Với $\alpha \neq \beta \neq \gamma$.

Để thuận tiện trong tính toán cho phương trình (2.9), ta đặt các thông số điều hòa k^b và phi điều hòa γ^b có dạng:

$$\begin{aligned} k^b &= \frac{1}{2} \sum_i \left(\frac{\partial^2 \varphi_{i0}^b}{\partial u_{i\beta}^2} \right)_{eq} = m^* \omega_b^2, \\ \gamma^b &= \frac{1}{12} \sum_i \left[\left(\frac{\partial^4 \varphi_{i0}^b}{\partial u_{i\beta}^4} \right)_{eq} + 6 \left(\frac{\partial^4 \varphi_{i0}^b}{\partial u_{i\beta}^2 \partial u_{i\gamma}^2} \right)_{eq} \right]. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Với ω_b là tần số dao động của các nguyên tử b, m^* là khối lượng nguyên tử trung bình của hệ và được xác định bởi $m^* = C^A.m_A + C^B.m_B + C^X.m_X$. Ở đó m_A, m_B, m_X và C^A, C^B, C^X là khối lượng và nồng độ của các nguyên tử A, B và X tương ứng trong tinh thể hợp chất perovskite ABX_3 .

Biểu thức (2.11) xác định các thông số dao động điều hòa và phi điều hòa quanh vị trí cân bằng của nguyên tử b qua đạo hàm bậc 2 và bậc 4 của thế năng tương tác giữa nguyên tử b với các nguyên tử phân bố quanh nó trong mạng tinh thể có cấu trúc perovskite. Trong ô cơ sở của mạng tinh thể vật liệu cấu trúc perovskite ABX_3 có 3 loại nguyên tử A, B và X nên sẽ tồn tại sự đóng góp các loại tương tác của nguyên tử cùng loại và khác loại lên nguyên tử b trong xác định thông số theo (2.11). Như vậy, dựa vào cấu trúc tinh thể perovskite sẽ giúp xác định số hạt, số loại hạt và phân bố không gian giữa các nguyên tử xung quanh nguyên tử b, từ đó tính được các tham số phụ thuộc cấu trúc vật liệu perovskite theo (2.11).

Để giải phương trình (2.9) ta biểu diễn mô men bậc 3 $\langle u_{i\alpha}u_{i\beta}u_{i\gamma} \rangle_a$, mô men bậc 2 $\langle u_{i\alpha}u_{i\beta} \rangle_a$ theo mô men bậc 1 bởi liên hệ sau [115]:

$$\langle u_{i\alpha}u_{i\gamma} \rangle_a = \langle u_{i\alpha} \rangle_a \langle u_{i\gamma} \rangle_a + \theta \frac{\partial \langle u_{i\alpha} \rangle_a}{\partial a_\gamma} + \frac{\hbar \delta_{\alpha\gamma}}{2m\omega} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2\theta}\right) - \frac{\theta \delta_{\alpha\gamma}}{2m\omega^2}, \quad (2.12)$$

$$\begin{aligned} \langle u_{i\alpha}u_{i\gamma}u_{i\eta} \rangle_a &= \langle u_{i\alpha} \rangle_a \langle u_{i\gamma} \rangle_a \langle u_{i\eta} \rangle_a + \theta P_{\alpha\gamma\eta} \langle u_{i\alpha} \rangle_a \frac{\partial \langle u_{i\gamma} \rangle_a}{\partial a_\eta} \\ &+ \theta^2 \frac{\partial^2 \langle u_{i\alpha} \rangle_a}{\partial a_\gamma \partial a_\eta} + \frac{\hbar \langle u_{i\eta} \rangle_a \delta_{\alpha\gamma}}{2m\omega} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2\theta}\right) - \frac{\langle u_{i\eta} \rangle_a \theta \delta_{\alpha\gamma}}{2m\omega^2}. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Trong đó, $P_{\alpha\gamma\eta}$ là toán tử hoán vị chỉ số, nó nhận giá trị 1 (khi $\alpha = \gamma = \eta$) hoặc 0 (các trường hợp chỉ số khác nhau), $\delta_{\alpha\gamma}$ là kí hiệu Kronecker.

Trong pha lập phương của tinh thể perovskite, độ dời trung bình theo 3 phương của 1 nguyên tử có giá trị không khác nhau đáng kể nên có thể lấy gần đúng: $\langle u_{i\alpha} \rangle_a \approx \langle u_{i\beta} \rangle_a \approx \langle u_{i\gamma} \rangle_a = y^b$. Khi đó phương trình (2.9) chuyển về dạng sau:

$$\gamma^b \theta^2 \frac{d^2 y^b}{da^2} + 3\gamma^b \theta y^b \frac{dy^b}{da} + \gamma^b (y^b)^3 + k^b y^b + \frac{\gamma^b \theta}{k^b} (x^b \coth x^b - 1) y^b - a = 0. \quad (2.14)$$

Phương trình (2.14) là phương trình vi phân phi tuyến. Vì ngoại lực a là nhỏ và tùy ý nên có thể được tìm nghiệm của phương trình (2.14) ở dạng:

$$y^b = y_0^b + A_1 a + A_2 a^2. \quad (2.15)$$

Khi không có ngoại lực, tương ứng $a = 0$ thì độ dời $y^b = y_0^b$. Hay y_0^b xác định độ dời của nguyên tử b khỏi vị trí cân bằng trong tinh thể khi không có ngoại lực. y_0^b có giá trị gần đúng được xác định dưới dạng [115]:

$$y_0^b = \sqrt{\frac{2\gamma^b \theta^2}{3(k^b)^3}} A^b. \quad (2.16)$$

Trong đó, hệ số A^b có biểu thức:

$$A^b = a_1^b + \frac{(\gamma^b)^2 \theta^2}{(k^b)^4} a_2^b + \frac{(\gamma^b)^3 \theta^3}{(k^b)^6} a_3^b + \frac{(\gamma^b)^4 \theta^4}{(k^b)^8} a_4^b + \frac{(\gamma^b)^5 \theta^5}{(k^b)^{10}} a_5^b + \frac{(\gamma^b)^6 \theta^6}{(k^b)^{12}} a_6^b. \quad (2.17)$$

Các hệ số $a_1^b, a_2^b, a_3^b, a_4^b, a_5^b$ và a_6^b được xác định như sau [115]:

$$a_1^b = 1 + \frac{x^b \coth x^b}{2}, \quad (2.18)$$

$$a_2^b = \frac{13}{3} + \frac{47}{6} x^b \coth x^b + \frac{23}{6} (x^b)^2 \coth^2 x^b + \frac{1}{2} (x^b)^3 \coth^3 x^b, \quad (2.19)$$

$$a_3^b = -\left(\frac{25}{3} + \frac{121}{6} x^b \coth x^b + \frac{50}{3} (x^b)^2 \coth^2 x^b + \frac{16}{3} (x^b)^3 \coth^3 x^b + \frac{1}{2} (x^b)^4 \coth^4 x^b \right), \quad (2.20)$$

$$a_4^b = \frac{43}{3} + \frac{93}{2} x^b \coth x^b + \frac{169}{3} (x^b)^2 \coth^2 x^b + \frac{83}{3} (x^b)^3 \coth^3 x^b + \frac{22}{3} (x^b)^4 \coth^4 x^b + \frac{1}{2} (x^b)^5 \coth^5 x^b, \quad (2.21)$$

$$a_5^b = - \left(\frac{103}{3} + \frac{794}{6} x^b \coth x^b + \frac{363}{2} (x^b)^2 \coth^2 x^b + \frac{391}{3} (x^b)^3 \coth^3 x^b + \frac{148}{3} (x^b)^4 \coth^4 x^b + \frac{53}{6} (x^b)^5 \coth^5 x^b + \frac{1}{2} (x^b)^6 \coth^6 x^b \right), \quad (2.22)$$

$$a_6^b = 65 + \frac{561}{2} (x^b \coth x^b) + \frac{1489}{3} (x^b \coth x^b)^2 + \frac{927}{2} (x^b \coth x^b)^3 + \frac{733}{3} (x^b \coth x^b)^4 + \frac{145}{2} (x^b \coth x^b)^5 + \frac{31}{3} (x^b \coth x^b)^6 + \frac{1}{2} (x^b \coth x^b)^7, \quad (2.23)$$

với $x^b = \frac{\hbar \omega_b}{2\theta}$.

Ở vùng nhiệt độ cao tương ứng với giới hạn $x \coth x \rightarrow 1$, khi đó các hiệu ứng lượng tử không thể hiện rõ, các tham số $a_1^b, a_2^b, a_3^b, a_4^b, a_5^b$ và a_6^b sẽ nhận các giá trị đơn giản:

$$a_1^b = \frac{3}{2}; a_2^b = \frac{33}{2}; a_3^b = -51; a_4^b = \frac{458}{3}; a_5^b = -\frac{1589}{3}; a_6^b = 1633. \quad (2.24)$$

Trong trường hợp này, biểu thức (2.16) cho thấy giá trị bình phương độ dời của nguyên tử khỏi vị trí cân bằng nút mạng $(y_0^b)^2$ được xác định theo nhiệt độ tới lũy thừa bậc T⁸.

Biểu thức (2.16) cho phép xác định độ dời y_0^b của nguyên tử b khỏi vị trí cân bằng nút mạng theo nhiệt độ, khi kể đến các dao động phi điều hòa của các nguyên tử trong tinh thể.

Do vật liệu cấu trúc perovskite ABX₃, được cấu thành từ 3 loại nguyên tử A, B và X, nên mỗi loại nguyên tử đóng góp vào độ dời trung bình $\overline{y_0^p}$ của các nguyên tử trong tinh thể perovskite khi không có ngoại lực tác dụng theo phân bố nồng độ hạt dưới dạng:

$$\overline{y_0^p} = C^A \cdot y_0^A + C^B \cdot y_0^B + C^X \cdot y_0^X . \quad (2.25)$$

Từ độ dời trung bình $\overline{y_0^p}$ của nguyên tử khối vị trí cân bằng nút mạng, ta có thể xác định khoảng lân cận gần nhất giữa hai nguyên tử ở nhiệt độ T trong tinh thể perovskite bằng cách cộng thêm khoảng lân cận gần nhất $r_1^p(0)$ giữa hai nguyên tử ở nhiệt độ $T = 0K$ theo biểu thức:

$$r_1^p(T) = r_1^p(0) + \overline{y_0^p} . \quad (2.26)$$

Trong mạng tinh thể vật liệu cấu trúc perovskite pha lập phương thì hằng số mạng liên hệ với khoảng lân cận gần nhất bởi hệ thức

$$a_c^p(T) = 2r_1^p(T) . \quad (2.27)$$

Như vậy, khi biết khoảng lân cận gần nhất $r_1^p(0)$ giữa hai nguyên tử trong tinh thể vật liệu perovskite ở nhiệt độ $T = 0K$, thông qua biểu thức (2.16) - (2.26) hiệu ứng phi điều hòa trong mạng tinh thể ở nhiệt độ T được biểu hiện bởi sự thay đổi hằng số mạng tinh thể theo nhiệt độ T và được xác định bởi biểu thức (2.27).

2.2. Năng lượng tự do

Ta sẽ tiếp tục áp dụng phương pháp thống kê mô men để tính năng lượng tự do của tinh thể cấu trúc perovskite pha lập phương.

Theo phương pháp thống kê mô men, một hệ thống kê có Hamiltonian đặc trưng ở dạng:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \alpha \hat{V} . \quad (2.28)$$

trong đó α là thông số và \hat{V} là toán tử tùy ý, ta thu được biểu thức liên hệ với năng lượng tự do của hệ $\Psi(\alpha)$:

$$\langle \hat{V} \rangle_a = - \frac{\partial \Psi(\alpha)}{\partial \alpha} . \quad (2.29)$$

Từ biểu thức (2.29) giúp ta xác định năng lượng tự do của hệ như sau [115]:

$$\Psi(\alpha) = \Psi_0 - \int_0^\alpha \langle \hat{V} \rangle_{\alpha'} d\alpha'. \quad (2.30)$$

Trong đó, Ψ_0 là năng lượng tự do của hệ tương ứng với Hamintonian \hat{H}_0 được xem như đã biết. Tức là bằng cách nào đó tìm được $\langle \hat{V} \rangle_\alpha$ thì ta có thể thu được biểu thức đối với năng lượng tự do $\Psi(\alpha)$.

Để áp dụng (2.30), ta cần xác định thế năng trung bình của hệ tinh thể cấu trúc perovskite. Thay (2.4) vào (2.2), ta thu được dạng khai triển năng lượng thế năng của tinh thể perovskite đến gần đúng lũy thừa bậc bốn của độ dời:

$$U^P = \frac{N^A}{2} \sum_i \left[\begin{aligned} & \varphi_{i0}^A(|\vec{a}_i|) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \left(\frac{\partial^2 \varphi_{i0}^A}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta}} \right)_{eq} u_{i\alpha} u_{i\beta} + \frac{1}{6} \sum_{\alpha,\beta,\gamma} \left(\frac{\partial^3 \varphi_{i0}^A}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma}} \right)_{eq} u_{i\alpha} u_{i\beta} u_{i\gamma} \\ & + \frac{1}{24} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\eta} \left(\frac{\partial^4 \varphi_{i0}^A}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma} \partial u_{i\eta}} \right)_{eq} u_{i\alpha} u_{i\beta} u_{i\gamma} u_{i\eta} \end{aligned} \right] \\ + \frac{N^B}{2} \sum_i \left[\begin{aligned} & \varphi_{i0}^B(|\vec{a}_i|) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \left(\frac{\partial^2 \varphi_{i0}^B}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta}} \right)_{eq} u_{i\alpha} u_{i\beta} + \frac{1}{6} \sum_{\alpha,\beta,\gamma} \left(\frac{\partial^3 \varphi_{i0}^B}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma}} \right)_{eq} u_{i\alpha} u_{i\beta} u_{i\gamma} \\ & + \frac{1}{24} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\eta} \left(\frac{\partial^4 \varphi_{i0}^B}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma} \partial u_{i\eta}} \right)_{eq} u_{i\alpha} u_{i\beta} u_{i\gamma} u_{i\eta} \end{aligned} \right] \\ + \frac{N^X}{2} \sum_i \left[\begin{aligned} & \varphi_{i0}^X(|\vec{a}_i|) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \left(\frac{\partial^2 \varphi_{i0}^X}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta}} \right)_{eq} u_{i\alpha} u_{i\beta} + \frac{1}{6} \sum_{\alpha,\beta,\gamma} \left(\frac{\partial^3 \varphi_{i0}^X}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma}} \right)_{eq} u_{i\alpha} u_{i\beta} u_{i\gamma} \\ & + \frac{1}{24} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\eta} \left(\frac{\partial^4 \varphi_{i0}^X}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma} \partial u_{i\eta}} \right)_{eq} u_{i\alpha} u_{i\beta} u_{i\gamma} u_{i\eta} \end{aligned} \right]. \quad (2.31)$$

Biểu thức (2.31) có thể viết ở dạng sau:

$$\begin{aligned}
U^p = & \frac{N^A}{2} \left[\sum_i \varphi_{i0}^A (|\vec{a}_i|) + \frac{1}{2} \sum_{i,\alpha,\beta} \left(\frac{\partial^2 \varphi_{i0}^A}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta}} \right)_{eq} u_{i\alpha} u_{i\beta} + \frac{1}{6} \sum_{i,\alpha,\beta,\gamma} \left(\frac{\partial^3 \varphi_{i0}^A}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma}} \right)_{eq} u_{i\alpha} u_{i\beta} u_{i\gamma} \right. \\
& \left. + \frac{1}{24} \sum_{i,\alpha,\beta,\gamma,\eta} \left(\frac{\partial^4 \varphi_{i0}^A}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma} \partial u_{i\eta}} \right)_{eq} u_{i\alpha} u_{i\beta} u_{i\gamma} u_{i\eta} \right] \\
& + \frac{N^B}{2} \left[\sum_i \varphi_{i0}^B (|\vec{a}_i|) + \frac{1}{2} \sum_{i,\alpha,\beta} \left(\frac{\partial^2 \varphi_{i0}^B}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta}} \right)_{eq} u_{i\alpha} u_{i\beta} + \frac{1}{6} \sum_{i,\alpha,\beta,\gamma} \left(\frac{\partial^3 \varphi_{i0}^B}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma}} \right)_{eq} u_{i\alpha} u_{i\beta} u_{i\gamma} \right. \\
& \left. + \frac{1}{24} \sum_{i,\alpha,\beta,\gamma,\eta} \left(\frac{\partial^4 \varphi_{i0}^B}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma} \partial u_{i\eta}} \right)_{eq} u_{i\alpha} u_{i\beta} u_{i\gamma} u_{i\eta} \right] \\
& + \frac{N^X}{2} \left[\sum_i \varphi_{i0}^X (|\vec{a}_i|) + \frac{1}{2} \sum_{i,\alpha,\beta} \left(\frac{\partial^2 \varphi_{i0}^X}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta}} \right)_{eq} u_{i\alpha} u_{i\beta} + \frac{1}{6} \sum_{i,\alpha,\beta,\gamma} \left(\frac{\partial^3 \varphi_{i0}^X}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma}} \right)_{eq} u_{i\alpha} u_{i\beta} u_{i\gamma} \right. \\
& \left. + \frac{1}{24} \sum_{i,\alpha,\beta,\gamma,\eta} \left(\frac{\partial^4 \varphi_{i0}^X}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma} \partial u_{i\eta}} \right)_{eq} u_{i\alpha} u_{i\beta} u_{i\gamma} u_{i\eta} \right].
\end{aligned} \tag{2.32}$$

Lấy trung bình (2.32) thu được thế năng trung bình của tinh thể perovskite ABX_3 có biểu thức:

$$\begin{aligned}
\langle U^p \rangle = & \frac{N^A}{2} \left[\sum_i \varphi_{i0}^A (|\vec{a}_i|) + \frac{1}{2} \sum_{i,\alpha,\beta} \left(\frac{\partial^2 \varphi_{i0}^A}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta}} \right)_{eq} \langle u_{i\alpha} u_{i\beta} \rangle + \frac{1}{6} \sum_{i,\alpha,\beta,\gamma} \left(\frac{\partial^3 \varphi_{i0}^A}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma}} \right)_{eq} \langle u_{i\alpha} u_{i\beta} u_{i\gamma} \rangle \right. \\
& \left. + \frac{1}{24} \sum_{i,\alpha,\beta,\gamma,\eta} \left(\frac{\partial^4 \varphi_{i0}^A}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma} \partial u_{i\eta}} \right)_{eq} \langle u_{i\alpha} u_{i\beta} u_{i\gamma} u_{i\eta} \rangle \right] \\
& + \frac{N^B}{2} \left[\sum_i \varphi_{i0}^B (|\vec{a}_i|) + \frac{1}{2} \sum_{i,\alpha,\beta} \left(\frac{\partial^2 \varphi_{i0}^B}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta}} \right)_{eq} \langle u_{i\alpha} u_{i\beta} \rangle + \frac{1}{6} \sum_{i,\alpha,\beta,\gamma} \left(\frac{\partial^3 \varphi_{i0}^B}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma}} \right)_{eq} \langle u_{i\alpha} u_{i\beta} u_{i\gamma} \rangle \right. \\
& \left. + \frac{1}{24} \sum_{i,\alpha,\beta,\gamma,\eta} \left(\frac{\partial^4 \varphi_{i0}^B}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma} \partial u_{i\eta}} \right)_{eq} \langle u_{i\alpha} u_{i\beta} u_{i\gamma} u_{i\eta} \rangle \right] \\
& + \frac{N^X}{2} \left[\sum_i \varphi_{i0}^X (|\vec{a}_i|) + \frac{1}{2} \sum_{i,\alpha,\beta} \left(\frac{\partial^2 \varphi_{i0}^X}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta}} \right)_{eq} \langle u_{i\alpha} u_{i\beta} \rangle + \frac{1}{6} \sum_{i,\alpha,\beta,\gamma} \left(\frac{\partial^3 \varphi_{i0}^X}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma}} \right)_{eq} \langle u_{i\alpha} u_{i\beta} u_{i\gamma} \rangle \right. \\
& \left. + \frac{1}{24} \sum_{i,\alpha,\beta,\gamma,\eta} \left(\frac{\partial^4 \varphi_{i0}^X}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{i\beta} \partial u_{i\gamma} \partial u_{i\eta}} \right)_{eq} \langle u_{i\alpha} u_{i\beta} u_{i\gamma} u_{i\eta} \rangle \right].
\end{aligned} \tag{2.33}$$

Trong (2.33) có số hạng mô men bậc 4 $\langle u_{i\alpha} u_{i\beta} u_{i\gamma} u_{i\eta} \rangle$, mô men bậc 3 $\langle u_{i\alpha} u_{i\beta} u_{i\gamma} \rangle$ và mô men bậc 2 $\langle u_{i\alpha} u_{i\beta} \rangle$. Các mô men này có thể biểu diễn qua mô men bậc 1 nhờ liên hệ mô men (2.12) - (2.13). Do tính chất đối xứng của tinh thể cấu trúc perovskite pha lập phương nên các số hạng trong (2.33) thỏa mãn (2.10) sẽ triệt tiêu. Chú ý thêm rằng, tinh thể perovskite pha lập phương có độ dài trung bình của một nguyên tử theo 3 phương khác nhau là không khác nhau nhiều nên có thể lấy gần đúng $\langle u_{i\alpha} \rangle \approx \langle u_{i\beta} \rangle \approx \langle u_{i\gamma} \rangle$. Do đó, thế năng trung bình (2.33) của tinh thể perovskite thu được kết quả như sau:

$$\begin{aligned} \langle U^p \rangle = & U_0^A + 3N^A \left[\frac{k^A}{2} \langle u_A^2 \rangle + \gamma_1^A \langle u_A^4 \rangle + \gamma_2^A \langle u_A^2 \rangle^2 \right] \\ & + U_0^B + 3N^B \left[\frac{k^B}{2} \langle u_B^2 \rangle + \gamma_1^B \langle u_B^4 \rangle + \gamma_2^B \langle u_B^2 \rangle^2 \right] \\ & + U_0^X + 3N^X \left[\frac{k^X}{2} \langle u_X^2 \rangle + \gamma_1^X \langle u_X^4 \rangle + \gamma_2^X \langle u_X^2 \rangle^2 \right]. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Trong đó, các hệ số k^b , γ_1^b và γ_2^b ($b = A, B, X$) có biểu thức xác định là:

$$\begin{aligned} k^b &= \frac{1}{2} \sum_i \left(\frac{\partial^2 \phi_{i0}^b}{\partial u_{i\beta}^2} \right)_{eq}, \\ \gamma_1^b &= \frac{1}{48} \sum_i \left(\frac{\partial^4 \phi_{i0}^b}{\partial u_{i\beta}^4} \right)_{eq}, \\ \gamma_2^b &= \frac{6}{48} \sum_i \left(\frac{\partial^4 \phi_{i0}^b}{\partial u_{i\beta}^2 \partial u_{i\gamma}^2} \right)_{eq}. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Các đại lượng U_0^b ($b = A, B, X$) được xác định bởi

$$U_0^b = \frac{N^b}{2} \sum_i \phi_{i0}^b(|\vec{a}_i|). \quad (2.36)$$

Trong biểu thức (2.34), số hạng $3N^b \frac{k^b}{2} \langle u_b^2 \rangle$ ($b = A, B, X$) là phần năng lượng đóng góp của dao động điều hòa và các số hạng còn lại $3N^A \left[\gamma_1^A \langle u_A^4 \rangle + \gamma_2^A \langle u_A^2 \rangle^2 \right]$ là phần năng lượng đóng góp của các dao động phi điều hòa vào thế năng trung bình của tinh thể perovskite pha lập phương.

Từ biểu thức (2.34), năng lượng tự do của các nguyên tử b ($b = A, B, X$) được xác định theo phương pháp thống kê mô men bởi biểu thức (2.30) qua việc tính các tích phân:

$$I_1 = \int_0^{\gamma_1^b} \langle u_b^4 \rangle d\gamma_1 \quad (2.37)$$

và

$$I_2 = \int_0^{\gamma_2^b} \langle u_b^2 \rangle_{\gamma_1^b=0}^2 d\gamma_2. \quad (2.38)$$

Để xác định tích phân (2.37) và (2.38), các mô men cấp cao $\langle u_b^4 \rangle$ và $\langle u_b^2 \rangle$ được biểu diễn qua các mô men cấp 1 $\langle u_b \rangle$ theo (2.12) và (2.13). Từ đó xác định được biểu thức năng lượng tự do Ψ_0^b của nguyên tử b trong tinh thể perovskite ABX_3 có dạng [115]:

$$\Psi^b = U_0^b + 3N^b \theta \left[x_b + \ln(1 - e^{-2x_b}) \right] + 3N^b \left\{ \begin{array}{l} \frac{\theta^2}{(k^b)^2} \left[\gamma_2^b x_b^2 \coth^2 x_b - \frac{2\gamma_1^b}{3} \left(1 + \frac{x_b \coth x_b}{2} \right) \right] \\ + \frac{2\theta^3}{(k^b)^4} \left[\frac{4}{3} (\gamma_2^b)^2 x_b \coth x_b \left(1 + \frac{x_b \coth x_b}{2} \right) - 2 \left((\gamma_1^b)^2 + 2\gamma_1^b \gamma_2^b \right) \left(1 + \frac{x_b \coth x_b}{2} \right) (1 + x_b \coth x_b) \right] \end{array} \right\}. \quad (2.39)$$

Do cấu tạo từ ba loại nguyên tử A, B và X, nên năng lượng tự do Ψ^p của tinh thể cấu trúc perovskite ABX_3 được xác định qua sự đóng góp của các

năng lượng tự do Ψ^b của các nguyên tử b có kể đến entropy cấu hình S_c bởi hệ thức Boltzmann [45], [46], [49], [50]:

$$\Psi^p = C^A \Psi^A + C^B \Psi^B + C^X \Psi^X - TS_c. \quad (2.40)$$

Khi xác định được các thông số k^b , γ_1^b và γ_2^b thì các biểu thức (2.39) và (2.40) cho phép xác định năng lượng tự do của các ion b ở nhiệt độ T . Khi nhiệt độ T gần nhiệt độ 0K thì có thể xác định năng lượng tự do của các nguyên tử như năng lượng tự do của hệ dao động tử điều hòa có năng lượng tự do Ψ_0^b xác định bởi:

$$\Psi_0^b = U_0^b + 3N^b \theta \left[x_b + \ln(1 - e^{-2x_b}) \right], \quad (2.41)$$

với $x_b = \frac{\hbar \omega_b}{2\theta}$, $\omega_b = \sqrt{\frac{k^b}{m^*}}$ và $\theta = k_B T$.

Năng lượng tự do của hệ xác định bởi:

$$\Psi_0^p = C^A \Psi_0^A + C^B \Psi_0^B + C^X \Psi_0^X - TS_c. \quad (2.42)$$

Từ năng lượng tự do và các thông số xác định tại nhiệt độ T cho phép xác định các đại lượng nhiệt động hệ số dẫn nở nhiệt, nhiệt dung đẳng áp, nhiệt dung đẳng tích,.. như ở phần tiếp theo.

2.3. Các đại lượng nhiệt động

2.3.1. Hệ số nở dài

Hệ số nở dài được định nghĩa bởi biểu thức sau:

$$\alpha = \frac{k_B}{a_0} \frac{da}{d\theta}, \quad (2.43)$$

trong đó a_0 và a là hằng số mạng ở 0K và nhiệt độ T .

Trong tinh thể perovskite pha lập phương, hằng số mạng liên hệ với khoảng lân cận gần nhất bởi hệ thức (2.27) nên hệ số nở dài xác định qua khoảng lân cận gần nhất $r_1^p(0)$ ở 0K và $r_1^p(T)$ ở nhiệt độ T bởi biểu thức:

$$\alpha_T^p = \frac{k_B}{r_1^p(0)} \frac{dr_1^p}{d\theta}. \quad (2.44)$$

Từ biểu thức (2.26), biểu thức (2.44) có thể viết ở dạng sau:

$$\alpha_T^p = \frac{k_B}{r_1^p(0)} \frac{d\overline{y_0^p}}{d\theta}. \quad (2.45)$$

Sử dụng biểu thức (2.25) và (2.45) ta thu được biểu thức hệ số nở dài α_T^p của tinh thể perovskite ABX_3 xác định qua sự đóng góp của các α_T^b của 3 loại nguyên tử A, B và X cấu thành bởi:

$$\alpha_T^p = C^A \alpha_T^A + C^B \alpha_T^B + C^X \alpha_T^X. \quad (2.46)$$

Trong đó

$$\alpha_T^A = \frac{k_B}{r_1(0)} \frac{\partial y_0^A}{\partial \theta}; \alpha_T^B = \frac{k_B}{r_1(0)} \frac{\partial y_0^B}{\partial \theta}; \alpha_T^X = \frac{k_B}{r_1(0)} \frac{\partial y_0^X}{\partial \theta}. \quad (2.47)$$

Khi các độ dời y_0^b ($b = A, B, X$) xác định theo (2.16) thì các biểu thức (2.47) có thể viết ở dạng sau:

$$\alpha_T^b = \frac{y_0^b}{r_1(0) \cdot T} \cdot \left(1 + \frac{\theta}{2 \cdot A^b} \cdot \frac{dA^b}{d\theta}\right). \quad (2.48)$$

Biểu thức (2.48) này hoàn toàn cho phép xác định hệ số nở dài α_T^b khi biết y_0^b .

2.3.2. Năng lượng và nhiệt dung đẳng tích

Năng lượng của tinh thể xác định qua năng lượng tự do bởi hệ thức nhiệt động Gibbs – Helmholtz:

$$E = \Psi - \theta \cdot \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \theta}\right). \quad (2.49)$$

Từ biểu thức năng lượng tự do (2.40), ta thu được biểu thức tính năng lượng của tinh thể perovskite

$$E^P = C^A E^A + C^B E^B + C^X E^X. \quad (2.50)$$

Trong đó:

$$E^A = \Psi^A - \theta \left(\frac{\partial \Psi^A}{\partial \theta} \right), E^B = \Psi^B - \theta \left(\frac{\partial \Psi^B}{\partial \theta} \right), E^X = \Psi^X - \theta \left(\frac{\partial \Psi^X}{\partial \theta} \right). \quad (2.51)$$

Thay biểu thức xác định năng lượng tự do (2.39) vào (2.51) ta có thể thu được biểu thức tính năng lượng:

$$E^b \approx U_0^b + 3 \cdot N^b \cdot x_b \cdot \coth x_b + \frac{3 \cdot N^b \cdot \theta^2}{(k^b)^2} \cdot \left[\gamma_2^b \cdot (x_b)^2 \cdot \coth^2 x_b + \frac{\gamma_1^b}{3} \cdot \left(2 + \frac{x_b^2}{\sinh^2 x_b} \right) - 2 \cdot \gamma_2^b \cdot \frac{x_b^3 \cdot \coth x_b}{\sinh^2 x_b} \right]. \quad (2.52)$$

Nhiệt dung đẳng tích C_V của tinh thể xác định qua năng lượng E của tinh thể bởi biểu thức:

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V. \quad (2.53)$$

Sử dụng biểu thức (2.50) vào (2.53) ta thu được biểu thức nhiệt dung đẳng tích của tinh thể perovskite ABX_3 có dạng sau:

$$C_V^P = \left(\frac{\partial E^P}{\partial T} \right)_V = C^A \cdot C_V^A + C^B \cdot C_V^B + C^X \cdot C_V^X. \quad (2.54)$$

Trong đó

$$C_V^A = \left(\frac{\partial E^A}{\partial T} \right)_V, C_V^B = \left(\frac{\partial E^B}{\partial T} \right)_V, C_V^X = \left(\frac{\partial E^X}{\partial T} \right)_V. \quad (2.55)$$

Áp dụng các biểu thức năng lượng (2.52) vào (2.55) ta thu được nhiệt dung đẳng tích C_V^b có biểu thức:

$$C_V^b = 3 \cdot N^b \cdot k_B \cdot \left\{ \frac{x_b^2}{\sinh^2 x_b} + \frac{29}{(k^b)^2} \cdot \left[\begin{array}{l} (2 \cdot \gamma_2^b + \frac{\gamma_1^b}{3}) \cdot \frac{x_b^3 \cdot \coth x_b}{\sinh^2 x_b} + \frac{2 \cdot \gamma_1^b}{3} \\ - \gamma_2^b \cdot \left(\frac{x_b^4}{\sinh^4 x_b} + 2 \cdot \frac{x_b^4 \cdot \coth^2 x_b}{\sinh^4 x_b} \right) \end{array} \right] \right\}. \quad (2.56)$$

2.3.3. Hệ số nén đẳng nhiệt và nhiệt dung đẳng áp

Hệ số nén đẳng nhiệt được xác định bởi:

$$\chi_T = -\frac{1}{V_0} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T. \quad (2.57)$$

Ở pha lập phương, hệ số nén đẳng nhiệt của tinh thể perovskite có thể xác định qua khoảng lân cận gần nhất ở 0K và ở nhiệt độ T bởi biểu thức

$$\chi_T^p = -\left(\frac{r_1^p(T)}{r_1^p(0)} \right)^3 \cdot \frac{3}{r_1^p(T) \cdot \left(\frac{\partial P}{\partial r_1^p} \right)_T}. \quad (2.58)$$

Mặt khác, áp suất xác định qua năng lượng tự do bởi biểu thức

$$P = -\left(\frac{\partial \Psi}{\partial V} \right)_T = -\frac{r_1}{3V} \cdot \left(\frac{\partial \Psi}{\partial r_1} \right)_T. \quad (2.59)$$

Do đó, hệ số nén đẳng nhiệt của tinh thể cấu trúc perovskite ABX₃ có dạng sau

$$\chi_T^p = \frac{3 \left(\frac{r_1^p(T)}{r_1^p(0)} \right)^3}{2P + \frac{(r_1^p(T))^3}{3V} \left(\frac{\partial^2 \Psi^p}{\partial r_1^2} \right)_T}. \quad (2.60)$$

Biết nhiệt dung đẳng tích C_V^p và hệ số nén đẳng nhiệt χ_T^p sẽ giúp xác định nhiệt dung đẳng áp C_P^p của tinh thể cấu trúc perovskite qua biểu thức

$$C_P^p = C_V^p + \frac{9 \cdot T \cdot V \cdot (\alpha_T^p)^2}{\chi_T^p}. \quad (2.61)$$

2.4. Kết quả tính số cho một số vật liệu cấu trúc perovskite

2.4.1. Thế năng tương tác

Ở các nút mạng tinh thể có thể là nguyên tử, phân tử hoặc ion. Giữa các hạt ở nút mạng có tương tác với nhau tạo thành thế năng tương tác của mạng tinh thể. Tùy theo từng loại tinh thể, dạng của thế năng có thể khác nhau. Việc

xác định dạng của chúng là một bài toán cơ học lượng tử và việc chọn dạng thích hợp của thế năng tương tác không phải đơn giản. Tuy nhiên, khi kết hợp sự phân tích giữa lí thuyết và thực nghiệm có thể chọn dạng thế năng tương tác khá đơn giản nhưng có hiệu quả trong việc xác định tính chất vĩ mô của vật rắn.

Tùy theo loại vật liệu và tính chất nghiên cứu mà dạng thế năng tương tác được sử dụng khác nhau. Trong vật liệu cấu trúc Perovskite ABX_3 , tại các nút mạng là các nguyên tử A, B và X. Nhiều mô hình thế năng bán thực nghiệm được đề xuất và áp dụng cho nghiên cứu tính chất vật liệu cấu trúc perovskite ABX_3 . Những tương tác xuất hiện giữa các nguyên tử nút mạng kể đến là tương tác Coulomb, tương tác cộng hóa trị, tương tác van der Waals. Trong các nghiên cứu, đa phần tương tác Coulomb giữa các ion trong tinh thể được tính toán gần đúng bởi phương pháp Ewald [26]. Sau đó Wolf [18], Demontis [22] and Zahn [133] đề xuất và tối ưu mô hình tính toán thế Coulomb trong tinh thể cho kết quả phù hợp trong nhiều tính toán và thực nghiệm, với biểu thức có dạng:

$$\varphi^c(r_{ij}) = q_i q_j \cdot \left\{ \frac{\operatorname{erfc}(\alpha r_{ij})}{r_{ij}} - \frac{\operatorname{erfc}(\alpha R_c)}{R_c} + \left[\frac{\operatorname{erfc}(\alpha R_c)}{R_c^2} + \frac{2\alpha}{\pi^{1/2}} \cdot \frac{\operatorname{erfc}(-\alpha^2 R_c^2)}{R_c} \right] (r_{ij} - R_c) \right\}, \quad (2.62)$$

trong đó q_i, q_j là các điện tích hiệu dụng, r_{ij} là khoảng cách giữa hai ion, R_c là bán kính ngắt và α là tham số tắt dần.

Biểu thức (2.62) giúp tính toán tương tác Coulomb đơn giản hơn và hội tụ nhanh hơn trong tính toán và mô phỏng.

Năm 2006, Pedone cùng các cộng sự đề xuất mô hình thế bán thực nghiệm cho tương tác trong vật liệu cho kết quả phù hợp với thực nghiệm và lí thuyết, với biểu thức thế năng tương tác có dạng [94]:

$$\varphi(r) = \frac{z_i z_j e^2}{r} + D_{ij} \left[\left\{ 1 - e^{-a_{ij}(r-r_0)} \right\}^2 - 1 \right] + \frac{C_{ij}}{r^{12}}. \quad (2.63)$$

Trong đó số hạng đầu tiên mô tả tương tác Coulomb giữa các ion i và j , số hạng thứ hai trình bày hàm thế năng Morse cho liên kết cộng hóa trị và số hạng thứ ba mô tả lực đẩy van der Waals.

Để tính toán cho vật liệu cấu trúc perovskite, thế tương tác cặp có dạng (2.63) được chọn sử dụng với gần đúng (2.62) khi tính toán đóng góp của tương tác Coulomb trong (2.63), nghĩa là biểu thức thế tương tác cặp giữa các ion được sử dụng dưới dạng:

$$U(r_{ij}) = q_i q_j \cdot \left\{ \frac{\operatorname{erfc}(\alpha r_{ij})}{r_{ij}} - \frac{\operatorname{erfc}(\alpha R_c)}{R_c} + \left[\frac{\operatorname{erfc}(\alpha R_c)}{R_c^2} + \frac{2\alpha}{\pi^2} \cdot \frac{\operatorname{erfc}(-\alpha^2 R_c^2)}{R_c} \right] (r_{ij} - R_c) \right\} + D_{ij} \left[\left\{ 1 - e^{-\beta_{ij}(r_{ij} - r_0)} \right\}^2 - 1 \right] + \frac{C_{ij}}{r_{ij}^{12}}. \quad (2.64)$$

Trong biểu thức (2.64), số hạng thứ nhất mô tả tương tác Coulomb giữa các ion i và j có các điện tích hiệu dụng q_i, q_j và cách nhau một khoảng r_{ij} . R_c là bán kính ngắt và α là tham số tắt dần. Số hạng thứ hai trình bày hàm thế năng Morse cho liên kết cộng hóa trị trong vật liệu cấu trúc Perovskite. Ở đó, D_{ij} , β_{ij} , r_0 là các tham số cho thế Morse. Số hạng cuối cùng mô tả lực đẩy van der Waals giữa các ion. Các tham số thế trong (2.64) có giá trị được xác định trong quá trình làm khớp kết quả tính toán với giá trị thực nghiệm.

Trong vật liệu cấu trúc perovskite, xuất hiện sự xen phủ orbital của các nguyên tử lân cận tạo nên liên kết cộng hóa trị, làm cho điện tích các ion tại nút mạng trở nên không nguyên và được xác nhận từ nhiều nghiên cứu dựa trên lý thuyết phiếm hàm mật độ [25], [96], [97]. Trong SrTiO_3 và BaTiO_3 , các nghiên cứu ab initio chỉ ra các giá trị điện tích không nguyên của ion nguyên tử Sr, Ba, Ti và O [31], [96]. Từ đó, nhiều mô hình thế năng bán thực nghiệm trong mô phỏng tính chất vật liệu SrTiO_3 , BaTiO_3 đã sử dụng điện tích không nguyên cho các ion trong các vật liệu này thu được kết quả phù hợp với lý thuyết và

thực nghiệm [35], [59]. Trong luận án này, điện tích ion nguyên tử của vật liệu SrTiO₃ được xác định từ nghiên cứu dựa trên lý thuyết phiếm hàm mật độ và trình bày trong Bảng 2.1 [96]. Do hằng số mạng và cấu hình điện tử khác với SrTiO₃ nên điện tích các ion của nguyên Ti và O trong BaTiO₃ có giá trị sai khác với điện tích của chúng trong SrTiO₃ và được trình bày trong Bảng 2.2.

Bảng 2.1. Tham số thể cho SrTiO₃

Ion	q_i (e) [96]			
Sr	1.87			
Ti	2.36			
O	-1.41			
Ion pair	D_{ij} (eV)	β_{ij} (Å⁻¹)	r_{0ij} (Å)	C_{ij} (eV.Å¹²)
Sr - O	0.016561	2.191500	3.328330	3.0
Ti - O	0.021905	2.085525	2.708943	1.0
O - O	0.151000	1.081100	3.618701	22.0

Các tham số thể của thế năng tương tác (2.64) cho các ion trong SrTiO₃ và BaTiO₃ được xác định dựa trên sự phù hợp giữa kết quả tính toán hằng số mạng của SrTiO₃ và BaTiO₃ với thực nghiệm. Các giá trị tham số đó cho SrTiO₃ và BaTiO₃ được trình bày tương ứng trong Bảng 2.1 và Bảng 2.2.

Bảng 2.2. Tham số thể cho BaTiO₃

Ion	q_i (e) [96]			
Ba	1.79			
Ti	2.38			
O	-1.39			
Ion pair	D_{ij} (eV)	β_{ij} (Å⁻¹)	r_{0ij} (Å)	C_{ij} (eV.Å¹²)
Ba - O	0.019561	2.071500	3.393410	5.0
Ti - O	0.021905	2.085525	2.708943	1.0
O - O	0.181000	1.098500	3.618701	22.0

Tối ưu tham số thể cho SrTiO₃, bán kính ngắ R_c cho Sr, Ti và O có giá trị lần lượt là 9.9145 (Å), 9.7220 (Å) và 9.7220 (Å). Tham số ngắ α có giá trị là 0.01 (Å⁻¹).

Đối với BaTiO₃, các tham số bán kính ngắ R_c cho Ba, Ti và O có giá trị lần lượt như sau: 10.1468 (Å) cho Ba, 9.9499 (Å) cho Ti và 9.9499 (Å) cho O. Để tính số các đại lượng nhiệt động, các giá trị hằng số vật lí bao gồm hằng số Boltzmann k_B , hằng số Plank h , hằng số điện và hằng số Avogadro N_A được sử dụng theo [85].

Sử dụng phương pháp quả cầu phối vị, năng lượng tương tác (2.36) của tinh thể perovskite có dạng

$$U_0^b = \frac{N^b}{2} \sum_q \left[z_{bq}^A \cdot \varphi^{bA}(r_{bq}) + z_{bq}^B \cdot \varphi^{bB}(r_{bq}) + z_{bq}^X \cdot \varphi^{bX}(r_{bq}) \right]. \quad (2.65)$$

Trong đó $z_{bq}^A, z_{bq}^B, z_{bq}^X$ lần lượt là số nguyên tử A, B và X trên quả cầu phối vị thứ q có tâm quả cầu là nguyên tử b (b = A, B, X). r_{bq} là bán kính quả cầu phối vị thứ q và được xác định qua liên hệ bán kính quả cầu phối vị thứ nhất r_{b1} bởi hệ thức

$$r_{bq} = \nu_{bq} \cdot r_{b1}. \quad (2.66)$$

Hệ số ν_{bq} và $z_{bq}^A, z_{bq}^B, z_{bq}^X$ phụ thuộc vào đặc trưng mạng tinh thể của vật liệu cấu trúc perovskite và loại nguyên tử được chọn làm gốc. Sử dụng phần mềm mô phỏng cấu trúc tinh thể Vesta [58] cho tinh thể perovskite sẽ giúp xác định các giá trị của $z_{bq}^A, z_{bq}^B, z_{bq}^X$ trên một số quả cầu phối vị trình bày trong Bảng 2.3.

Bảng 2.3. Các tham số U_{bq} và $z_{bq}^A, z_{bq}^B, z_{bq}^X$ của cấu trúc tinh thể perovskite ABX_3

STT	Quả cầu phối vị q	z_{Aq}^A	z_{Aq}^B	z_{Aq}^X	z_{Bq}^A	z_{Bq}^B	z_{Bq}^X	z_{Xq}^A	z_{Xq}^B	z_{Xq}^X	U_{Aq}	U_{Bq}	U_{Bq}
1	1	0	0	12	0	0	6	0	2	0	1	1	1
2	2	0	8	0	8	0	0	4	0	8	$\sqrt{\frac{3}{2}}$	$\sqrt{3}$	$\sqrt{2}$
3	3	6	0	0	0	6	0	0	0	6	$\sqrt{2}$	2	2
4	4	0	0	24	0	0	24	0	8	0	$\sqrt{3}$	$\sqrt{5}$	$\sqrt{5}$
5	5	12	0	0	0	12	0	8	0	16	2	$2\sqrt{2}$	$\sqrt{6}$
6	6	0	0	24	0	0	30	0	0	12	$\sqrt{5}$	3	$2\sqrt{2}$
7	7	0	24	0	24	0	0	0	10	0	$\sqrt{5.5}$	$\sqrt{11}$	3
8	8	8	0	0	0	8	0	8	0	16	$\sqrt{6}$	$\sqrt{12}$	$\sqrt{10}$
9	9	0	0	48	0	0	24	0	0	8	$\sqrt{7}$	$\sqrt{13}$	$2\sqrt{3}$
10	10	6	0	0	0	6	0	0	8	0	$2\sqrt{2}$	4	$\sqrt{13}$
11	11	0	0	36	0	0	48	16	0	32	3	$\sqrt{17}$	$\sqrt{14}$
12	12	0	24	0	24	0	0	0	0	6	$\sqrt{9.5}$	$\sqrt{19}$	4
13	13	24	0	0	0	24	0	0	16	0	$\sqrt{10}$	$\sqrt{20}$	$\sqrt{17}$
14	14	0	0	24	0	0	48	12	0	24	$\sqrt{11}$	$\sqrt{21}$	$3\sqrt{2}$
15	15	24	0	0	0	24	0	0	0	24	$\sqrt{12}$	$\sqrt{24}$	$2\sqrt{5}$
16	16	0	0	72	0	0	30	0	16	0	$\sqrt{13}$	5	$\sqrt{21}$
17	17	0	32	0	32	0	0	8	0	16	$\sqrt{13.5}$	9	$\sqrt{22}$
18	18	0	0	48	0	0	72	0	0	24	$\sqrt{15}$	$\sqrt{29}$	$2\sqrt{6}$
19	19	12	0	0	0	12	0	0	10	0	4	$\sqrt{32}$	5
20	20	0	0	48	0	0	48	24	0	48	$\sqrt{17}$	$\sqrt{33}$	$\sqrt{26}$
21	21	0	48	0	48	0	0	0	24	0	$\sqrt{17.5}$	$\sqrt{35}$	$\sqrt{29}$
22	22	30	0	0	0	30	0	16	0	32	$\sqrt{18}$	6	$\sqrt{30}$

STT	Quả cầu phối vị q	z_{Aq}^A	z_{Aq}^B	z_{Aq}^X	z_{Bq}^A	z_{Bq}^B	z_{Bq}^X	z_{Xq}^A	z_{Xq}^B	z_{Xq}^X	ν_{Aq}	ν_{Bq}	ν_{Bq}
23	23	0	0	72	0	0	24	0	0	12	$\sqrt{19}$	$\sqrt{37}$	$\sqrt{32}$
24	24	24	0	0	0	24	0	0	16	0	$\sqrt{20}$	$\sqrt{40}$	$\sqrt{33}$
25	25	0	0	48	0	0	96	16	0	32	$\sqrt{21}$	$\sqrt{41}$	$\sqrt{34}$
26	26	0	24	0	24	0	0	0	0	30	$\sqrt{21.5}$	$\sqrt{43}$	6
27	27	24	0	0	0	24	0	0	8	0	$\sqrt{22}$	$\sqrt{44}$	$\sqrt{37}$
28	28	0	0	48	0	0	72	24	0	48	$\sqrt{23}$	$\sqrt{45}$	$\sqrt{38}$
29	29	8	0	0	0	8	0	0	0	24	$\sqrt{24}$	$\sqrt{48}$	$\sqrt{40}$
30	30	0	0	84	0	0	54	0	32	0	5	7	$\sqrt{41}$
31	31	0	48	0	48	0	0	16	0	32	$\sqrt{25.5}$	$\sqrt{51}$	$\sqrt{42}$
32	32	24	0	0	0	24	0	0	0	24	$\sqrt{26}$	$\sqrt{52}$	$\sqrt{44}$
33	33	0	0	96	0	0	72	0	24	0	$\sqrt{27}$	$\sqrt{53}$	$\sqrt{45}$
34	34	48	0	0	0	48	0	16	0	32	$\sqrt{28}$	$\sqrt{56}$	$\sqrt{46}$
35	35	0	0	24	0	0	48	0	0	8	$\sqrt{29}$	$\sqrt{57}$	$\sqrt{48}$
36	36	0	72	0	72	0	0	0	18	0	$\sqrt{29.5}$	$\sqrt{59}$	7
37	37	0	0	96	0	0	72	28	0	56	$\sqrt{31}$	$\sqrt{61}$	$\sqrt{50}$

Sử dụng các giá trị ν_{bq} và $z_{bq}^A, z_{bq}^B, z_{bq}^X$ trong Bảng 2.3 và các biểu thức

giải tích tương ứng sẽ giúp xác định giá trị của tham số k^b, γ^b và đại lượng nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite.

2.4.2. Xác định các thông số

Để áp dụng tính số cho các biểu thức giải tích của các đại lượng nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite ta cần biết các thông số $k^b, \gamma_1^b, \gamma_2^b, \gamma^b$ của các vật liệu này. Muốn xác định các thông số đó, trước hết ta xác định khoảng lân cận gần nhất $r_1^p(0,0)$ ở 0 K và áp suất $P = 0$ GPa. Khoảng lân cận gần nhất

$r_1^p(0,0)$ là nghiệm của phương trình trạng thái ở 0K và áp suất $P = 0 \text{ GPa}$ có dạng:

$$\frac{\partial \Psi_0^p}{\partial r_1} = 0. \quad (2.67)$$

Đặt biểu thức (2.41), (2.42) vào (2.67) thì khoảng lân cận gần nhất $r_1^p(0,0)$ là nghiệm của phương trình

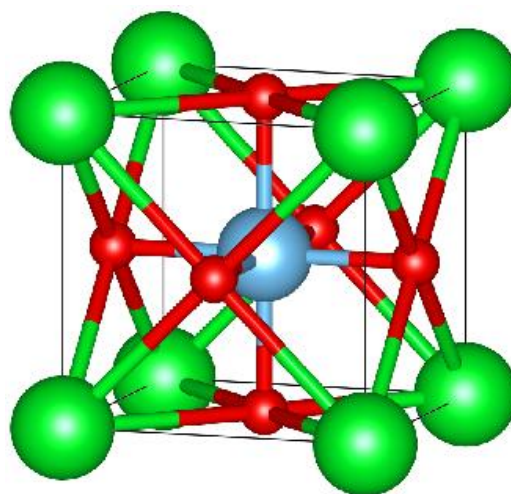
$$C^A \left[\frac{1}{6} \frac{\partial U_0^A}{\partial r_1} + \frac{\hbar \omega_A}{4k^A} \cdot \frac{\partial k^A}{\partial r_1} \right] + C^B \left[\frac{1}{6} \frac{\partial U_0^B}{\partial r_1} + \frac{\hbar \omega_B}{4k^B} \cdot \frac{\partial k^B}{\partial r_1} \right] + C^X \left[\frac{1}{6} \frac{\partial U_0^X}{\partial r_1} + \frac{\hbar \omega_X}{4k^X} \cdot \frac{\partial k^X}{\partial r_1} \right] = 0. \quad (2.68)$$

Giải phương trình (2.68) với U_0^b ($b = A, B, X$) xác định theo (2.65) ta thu được khoảng lân cận gần nhất $r_1^p(0,0)$ giữa các nguyên tử trong tinh thể vật liệu cấu trúc perovskite ở nhiệt độ 0K và áp suất $P = 0 \text{ GPa}$.

Sau khi xác định được $r_1^p(0,0)$, ta sẽ xác định các thông số $k^b, \gamma_1^b, \gamma_2^b, \gamma^b$ của vật liệu cấu trúc perovskite theo (2.11), (2.35). Thay giá trị của các thông số thu được vào các biểu thức giải tích của các đại lượng nhiệt động như độ dời của nguyên tử khỏi vị trí cân bằng nút mạng (2.25), hằng số mạng (2.27), hệ số dẫn nở nhiệt (2.46), nhiệt dung đẳng tích (2.54), hệ số nén đẳng nhiệt (2.60), nhiệt dung đẳng áp (2.61), ta sẽ thu được giá trị các đại lượng nhiệt động tương ứng của tinh thể cấu trúc perovskite.

2.4.3. Tính chất nhiệt động của SrTiO₃ ở áp suất $P = 0 \text{ GPa}$

Tinh thể perovskite SrTiO₃ có cấu trúc lập phương với nhóm không gian $Pm\bar{3}m$ ở trên 110K [28]. Ở nhiệt độ phòng, SrTiO₃ có hằng số mạng là 3.905 Å [13], [23]. Cấu trúc một ô cơ sở của tinh thể SrTiO₃ lập phương trình bày trong Hình 2.1.



Hình 2.1. Ô cơ sở của tinh thể SrTiO_3 . Nguyên tử Sr đặt ở góc, nguyên tử Ti đặt tại tâm và các nguyên tử oxi O đặt tại tâm mặt của ô cơ sở.

Áp dụng thế năng tương tác (2.64) vào các biểu thức của các đại lượng nhiệt động sẽ thu được các giá trị tính số các đại lượng nhiệt động của SrTiO_3 ở nhiệt độ T . Ở áp suất $P = 0 \text{ GPa}$, hằng số mạng của SrTiO_3 ở nhiệt độ phòng tính theo biểu thức (2.27) là 3.9051 (\AA) và trình bày trong Bảng 2.4 cùng với kết quả thực nghiệm và tính toán khác.

Bảng 2.4. Hằng số mạng của SrTiO_3 ở nhiệt độ phòng và áp suất $P = 0 \text{ GPa}$.

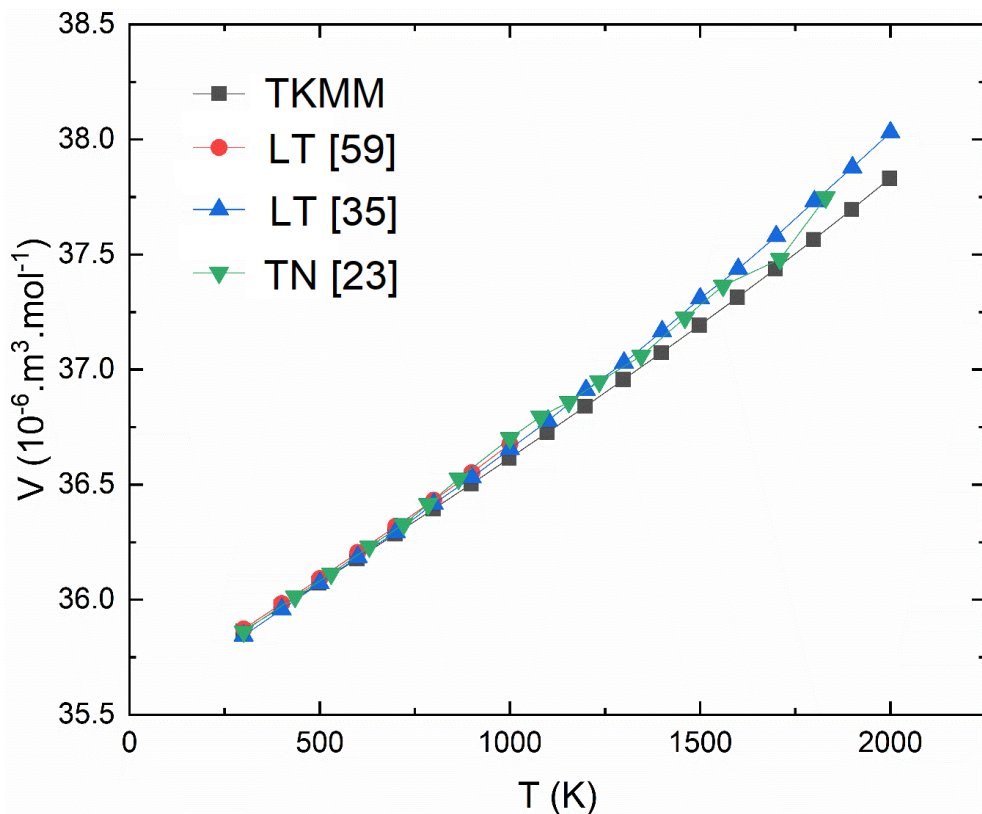
Hằng số mạng	TKMM	Thực nghiệm	Tính toán
$a \text{ (\AA)}$	3.9051	3.9051 [23] 3.9050 [130]	3.9056 [35] 3.9055 [59]

Ta thấy kết quả tính toán hằng số mạng của SrTiO_3 có giá trị phù hợp với các kết quả tính toán [35], [59] và thực nghiệm [23], [130]. Kết quả khẳng định giá trị tối ưu của tham số thế được lựa chọn phù hợp cho nghiên cứu tính chất nhiệt động khác của SrTiO_3 .

Sử dụng các phương trình (2.25), (2.16), (2.26) và (2.27) cho SrTiO_3 , thế tích của SrTiO_3 được tính toán trong vùng rộng của nhiệt độ từ nhiệt độ phòng tới 1998 K và kết quả được trình bày trên đồ thị trong Hình 2.2. Đồ thị tính toán

thông số mạng bằng phương pháp thống kê mô men theo nhiệt độ phù hợp tốt với thực nghiệm [23] và kết quả tính toán [35], [59] trong vùng rộng của nhiệt độ từ nhiệt độ phòng tới nhiệt độ cao.

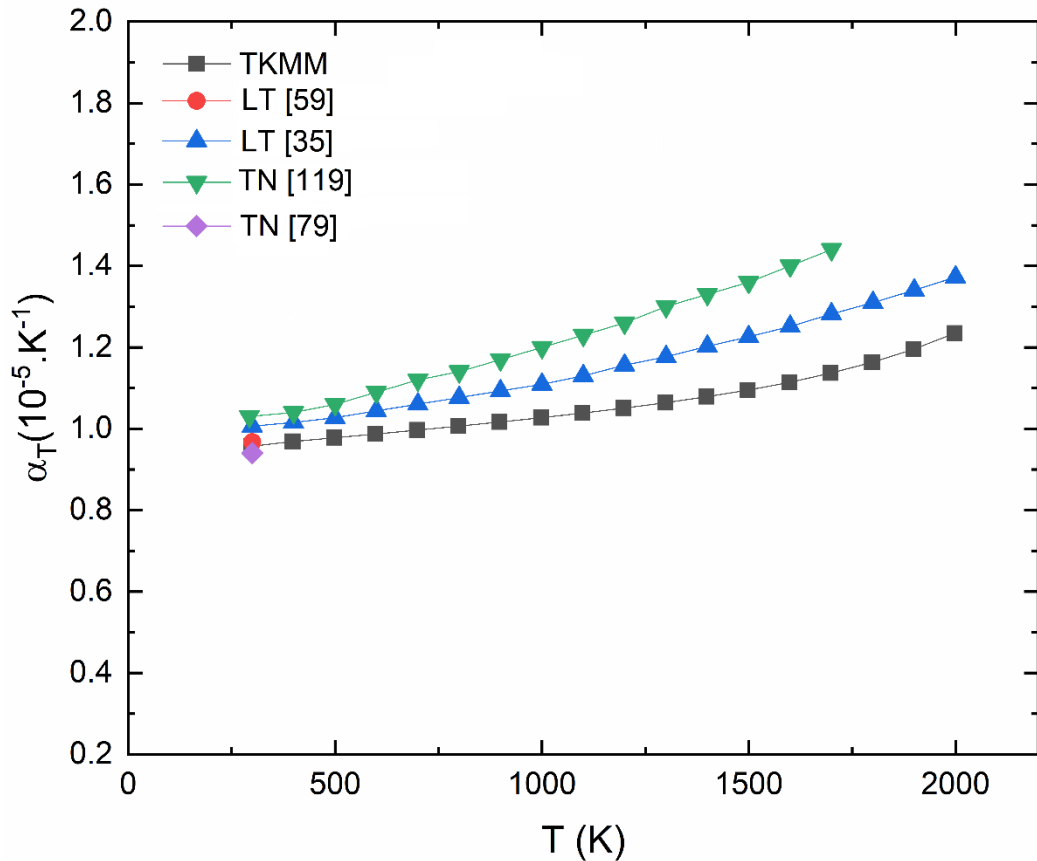
Từ đồ thị Hình 2.2, thể tích của tinh thể SrTiO₃ là hàm của nhiệt độ, khi nhiệt độ tăng thì thể tích tăng. Điều này có thể giải thích bởi sự tăng cường các dao động phi điều hòa của các nguyên tử nút mạng trong tinh thể SrTiO₃ khi nhiệt độ tăng. Khi nhiệt độ tăng từ nhiệt độ phòng đến 1998K thì thể tích tăng khoảng 5.5% và hệ số góc của đồ thị $|dV / dT|$ nhận các giá trị thay đổi trong khoảng $0.00103 - 0.00134 (10^{-6} \cdot m^3 \cdot mol^{-1} / K)$. Điều này chỉ ra rằng thể tích của SrTiO₃ không là hàm tuyến tính nhiệt độ và hệ số nở vì nhiệt của vật liệu SrTiO₃ sẽ thay đổi theo nhiệt độ.



Hình 2.2. Sự thay đổi thể tích của SrTiO₃ theo nhiệt độ từ tính toán và thực nghiệm.

Tiếp tục sử dụng phương trình (2.46) và (2.48) cho SrTiO₃, hệ số nở vì nhiệt α_T của SrTiO₃ được tính số và trình bày kết quả trong Hình 2.3 cùng với sự so sánh với thực nghiệm và một số nghiên cứu lí thuyết khác.

Chúng ta có thể thấy rằng α_T tăng từ giá trị $0.96 \times 10^{-5} \text{K}^{-1}$ đến $1.23 \times 10^{-5} \text{K}^{-1}$ khi nhiệt độ tăng từ nhiệt độ phòng đến 1998 K. Sự thay đổi của α_T với nhiệt độ liên hệ tới sự thay đổi không tuyến tính của tham số mạng của SrTiO₃ với nhiệt độ. Kết quả này cho thấy sự dẫn nở vì nhiệt của khối bát diện TiO₆ trong tinh thể SrTiO₃ lập phương khi nhiệt độ thay đổi.



Hình 2.3. Sự phụ thuộc nhiệt độ của hệ số nở dài của SrTiO₃.

Trong Hình 2.3, cho thấy, kết quả tính toán bằng PPTKMM sai lệch so với kết quả thực nghiệm [119] nhiều hơn so với kết quả tính toán lí thuyết [35].

Tuy nhiên, quy luật biến đổi theo nhiệt độ của hệ số nở dài từ tính toán bằng PPTKMM cũng tương tự như kết quả thực nghiệm [119] trong toàn vùng nhiệt độ. Ở nhiệt độ phòng, kết quả tính toán bằng PPTKMM phù hợp tốt với kết quả tính toán động lực học phân tử của Katsumata [59] và kết quả thực nghiệm [79].

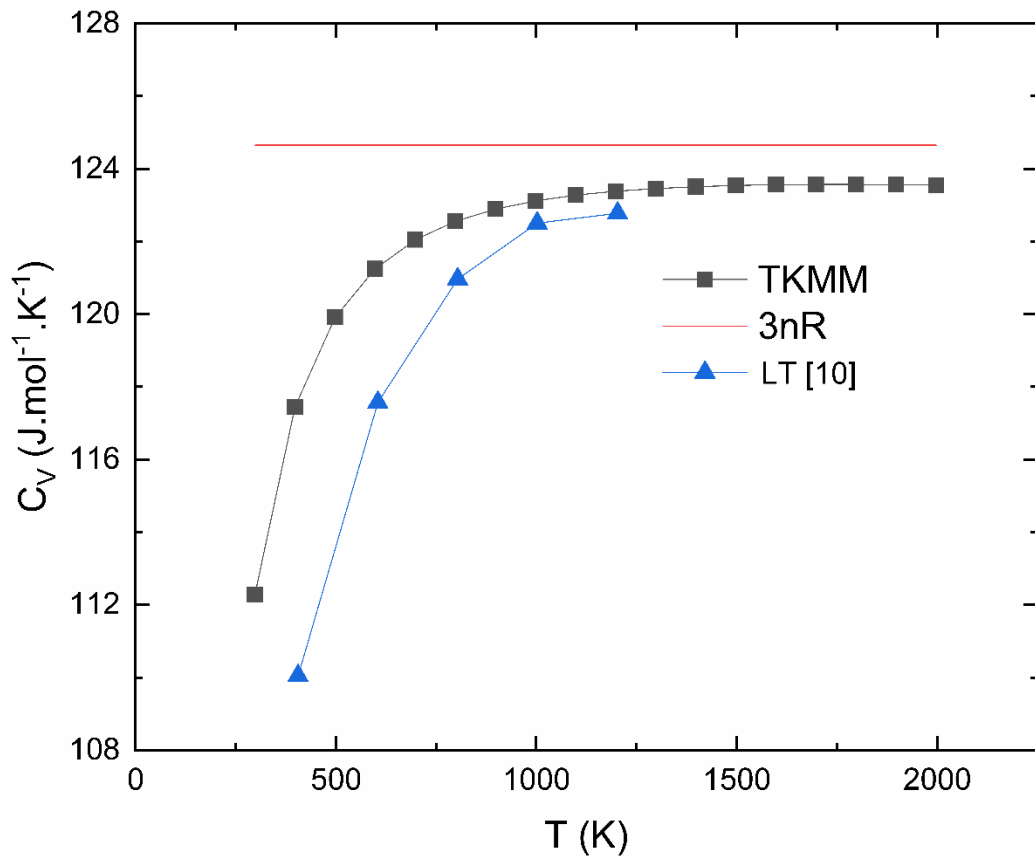
Hình 2.3 cũng cho thấy, kết quả tính toán bằng PPTKMM nhỏ hơn giá trị tính toán lí thuyết của Goh [35] và kết quả đo thực nghiệm [119]. Từ nhiệt độ phòng tới 1998 K, sự thay đổi của hệ số nở dài của SrTiO₃ vào khoảng 28%, nhỏ hơn kết quả tính toán của Goh [35] (khoảng 36%) và thực nghiệm [119]. Ngoài ra, kết quả tính toán b chỉ ra sự thay đổi nhỏ của hệ số nở dài của SrTiO₃ khi nhiệt độ thay đổi và phù hợp với kết quả thực nghiệm [23], ở thực nghiệm này hệ số nở vì nhiệt của SrTiO₃ thay đổi rất nhỏ theo nhiệt độ. Ở vùng nhiệt độ cao, hệ số nở dài của SrTiO₃ theo tính toán bằng phương pháp thống kê mô men tiến gần hơn giá trị thực nghiệm [23].

Sử dụng các phương trình (2.50)-(2.56), nhiệt dung đẳng tích C_V của SrTiO₃ được tính số và trình bày kết quả tính toán trong Hình 2.4.

Đồ thị nhiệt dung đẳng tích C_V của SrTiO₃ có phần dốc lớn thể hiện sự thay đổi rất nhiều của nhiệt dung đẳng tích trong vùng nhiệt độ từ nhiệt độ phòng đến khoảng 900 K. Ở vùng nhiệt độ cao trên 900 K, nhiệt dung đẳng tích C_V của SrTiO₃ biến đổi chậm, tiệm cận giá trị không đổi $3nR$ và phù hợp với định luật Dulong Petit cho vùng nhiệt độ cao của nhiều tinh thể.

Khi so sánh với kết quả lí thuyết khác, đồ thị đường cong nhiệt dung đẳng tích C_V của SrTiO₃ tính toán bằng PPTKMM phù hợp với tính toán của A.Boudali [10]. Hơn nữa, kết quả tính toán bằng PPTKMM lớn hơn kết quả

tính toán lí thuyết ab initio của A.Boudali [10] và tiệm cận gần hơn với giá trị $3nR$. Kết quả khác nhau này là do trong tính toán bằng PPTKMM có kể đến đóng góp của các dao động phi điều hòa của các nguyên tử vào nhiệt dung C_V của SrTiO_3 , còn trong tính toán [10] chỉ sử dụng dao động mạng giả điều hòa theo mô hình Debye.

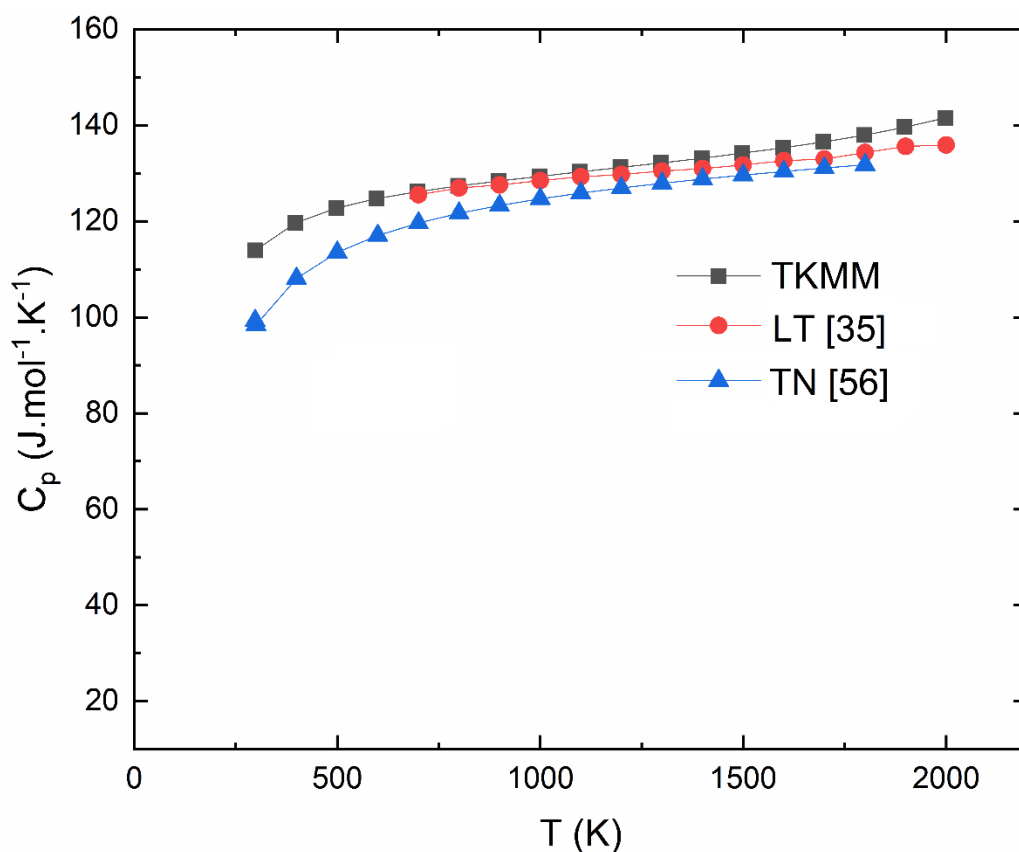


Hình 2.4. Nhiệt dung đẳng tích của SrTiO_3 như là hàm của nhiệt độ.

Thay thế giá trị tính toán C_V , α_T và χ_T vào (2.61) sẽ thu được giá trị nhiệt dung đẳng áp C_p của SrTiO_3 từ nhiệt độ phòng đến 1998 K và trình bày trong Hình 2.5.

Đồ thị C_p trong Hình 2.5 là những đường cong, thể hiện sự phụ thuộc không tuyến tính của nhiệt dung đẳng áp C_p vào nhiệt độ. Sự phụ thuộc đó là

do kể đến các đóng góp của dao động phi điều hòa của nguyên tử trong tinh thể vật liệu SrTiO₃. Từ nhiệt độ phòng tới khoảng 498 K, hệ số góc của đường cong $|dC_p / dT|$ có giá trị thay đổi trong khoảng 0.031–0.058(J.mol⁻¹.K⁻²). Trong vùng nhiệt độ lớn hơn 498 K thì hệ số góc của đường cong $|dC_p / dT|$ nhỏ hơn và có giá trị trong khoảng 0.009–0.019(J.mol⁻¹.K⁻²). Kết quả này cho thấy nhiệt dung đẳng áp C_p của SrTiO₃ phụ thuộc mạnh vào nhiệt độ ở vùng nhiệt độ thấp, cỡ nhỏ hơn 498 K, biểu thị bởi đồ thị trong vùng nhiệt độ có độ dốc cao.



Hình 2.5. Sự phụ thuộc nhiệt độ của nhiệt dung đẳng áp C_p của SrTiO₃.

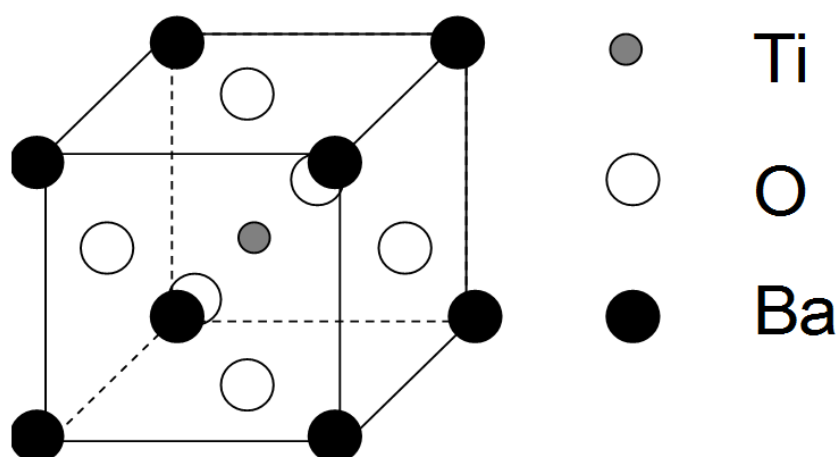
Khi so sánh với kết quả thực nghiệm [56] và lí thuyết [35], kết quả tính toán bằng PPTKMM thể hiện phù hợp tốt với cả lí thuyết và thực nghiệm. Giá

trị tính toán bằng PPTKMM có lớn hơn giá trị tính toán lí thuyết [35]. Hơn nữa, Hình 2.5 cũng chỉ ra dạng đường cong của đồ thị nhiệt dung đẳng áp tính toán từ PPTKMM phù hợp tốt hơn với thực nghiệm [56] trong toàn vùng nhiệt độ. Điều đó cho thấy đóng góp quan trọng của các dao động phi điều hòa của nguyên tử vào nhiệt dung đẳng áp của SrTiO₃.

Như vậy, kết quả tính toán các đại lượng nhiệt động cho vật liệu cấu trúc perovskite SrTiO₃ bằng PPTKMM như hằng số mạng, hệ số dẫn nở nhiệt, nhiệt dung đẳng áp, nhiệt dung đẳng tích, phù hợp tốt với thực nghiệm và lí thuyết khác trong vùng rộng của nhiệt độ. Sự phù hợp đó đã khẳng định phương pháp thống kê mô men có thể áp dụng hiệu quả nghiên cứu tính chất nhiệt động của vật liệu perovskite SrTiO₃.

2.4.4. Tính chất nhiệt động của BaTiO₃ ở áp suất P = 0 GPa

Barium titanate (BaTiO₃) là một trong những vật liệu có cấu trúc perovskite điển hình. BaTiO₃ có cấu trúc lập phương và hằng số mạng 3.996 Å ở 120 °C [53], [54], [84], [103], [109]. Ô cơ sở của BaTiO₃ cấu trúc lập phương trình bày trong Hình 2.6 với nguyên tử Ba ở góc, nguyên tử Ti ở tâm và ba nguyên tử O ở tâm của các mặt bên.



Hình 2.6. Ô cơ sở của BaTiO₃ cấu trúc lập phương.

Sử dụng thế năng tương tác cặp (2.64) và biểu thức của các đại lượng nhiệt động tương ứng sẽ thu các giá trị tính số của các đại lượng nhiệt động của BaTiO₃ ở các nhiệt độ T.

Ở áp suất $P = 0 \text{ GPa}$, hằng số mạng của BaTiO₃ ở 120 K tính theo biểu thức (2.27) là 3.996 (Å) và được trình bày trong Bảng 2.5.

Bảng 2.5. Hằng số mạng của BaTiO₃ ở 120 °C và áp suất P = 0 GPa.

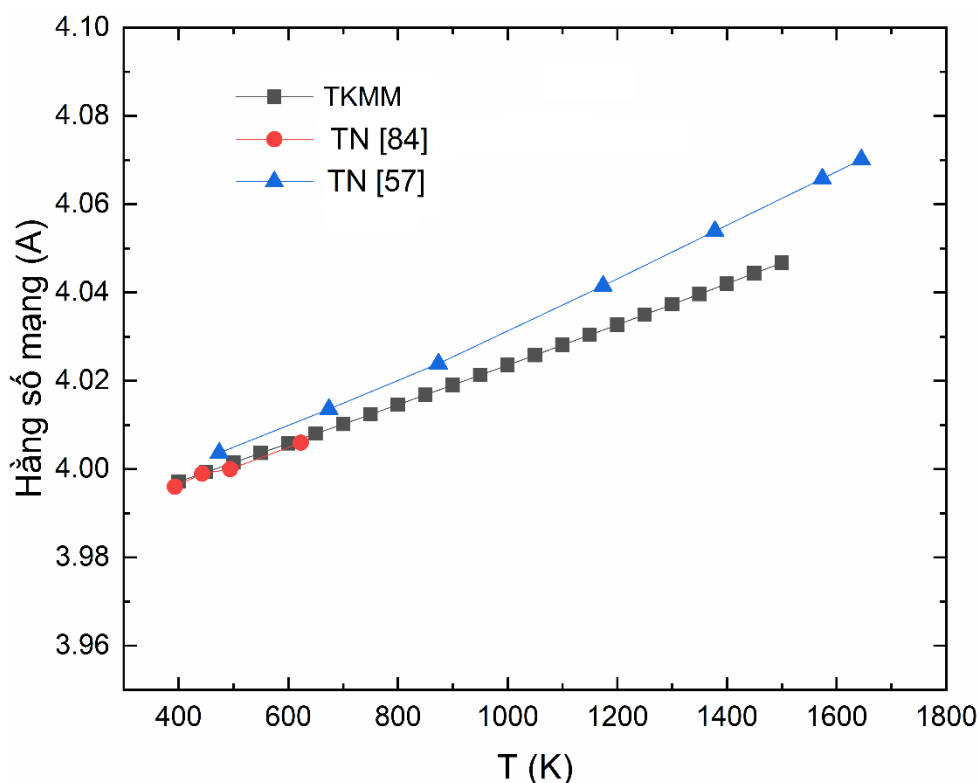
Hằng số mạng	TKMM	Thực nghiệm
a (Å)	3.996	3.996 [84]

Kết quả tính toán hằng số mạng phù hợp với giá trị thực nghiệm là cơ sở cho phép lựa chọn tham số thế phù hợp cho nghiên cứu tính chất nhiệt động khác của BaTiO₃.

Sử dụng các phương trình (2.25), (2.16), (2.26) và (2.27) cho BaTiO₃, hằng số mạng của BaTiO₃ được tiếp tục tính toán trong vùng rộng của nhiệt độ từ 400 K tới 1500 K và được trình bày trong Hình 2.7. Đồ thị tính toán hằng số mạng bằng PPTKMM theo nhiệt độ phù hợp tốt với thực nghiệm [84] và thấp hơn kết quả thực nghiệm [57]. Tuy vậy, kết quả chỉ ra quy luật phụ thuộc nhiệt độ phù hợp cả hai kết quả thực nghiệm [57], [84] trong vùng rộng của nhiệt độ.

Đồ thị trong Hình 2.7 là đường đi lên, điều đó cho thấy hằng số mạng a_c của tinh thể BaTiO₃ là hàm của nhiệt độ, khi nhiệt độ tăng thì hằng số mạng tăng. Điều này có thể giải thích bởi sự tăng cường các dao động phi điều hòa của các nguyên tử nút mạng trong tinh thể BaTiO₃ khi nhiệt độ tăng. Khi nhiệt độ tăng từ 400 K đến 1500 K thì hằng số mạng tăng khoảng 1.2% và hệ số góc của đồ thị $|da_c / dT|$ nhận các giá trị thay đổi trong khoảng

$0.043 - 0.047 (10^{-3} \cdot \text{Å} / \text{K})$. Điều này chỉ ra rằng hằng số mạng của BaTiO_3 không là hàm tuyến tính của nhiệt độ và hệ số nở vì nhiệt của vật liệu BaTiO_3 sẽ thay đổi theo nhiệt độ.

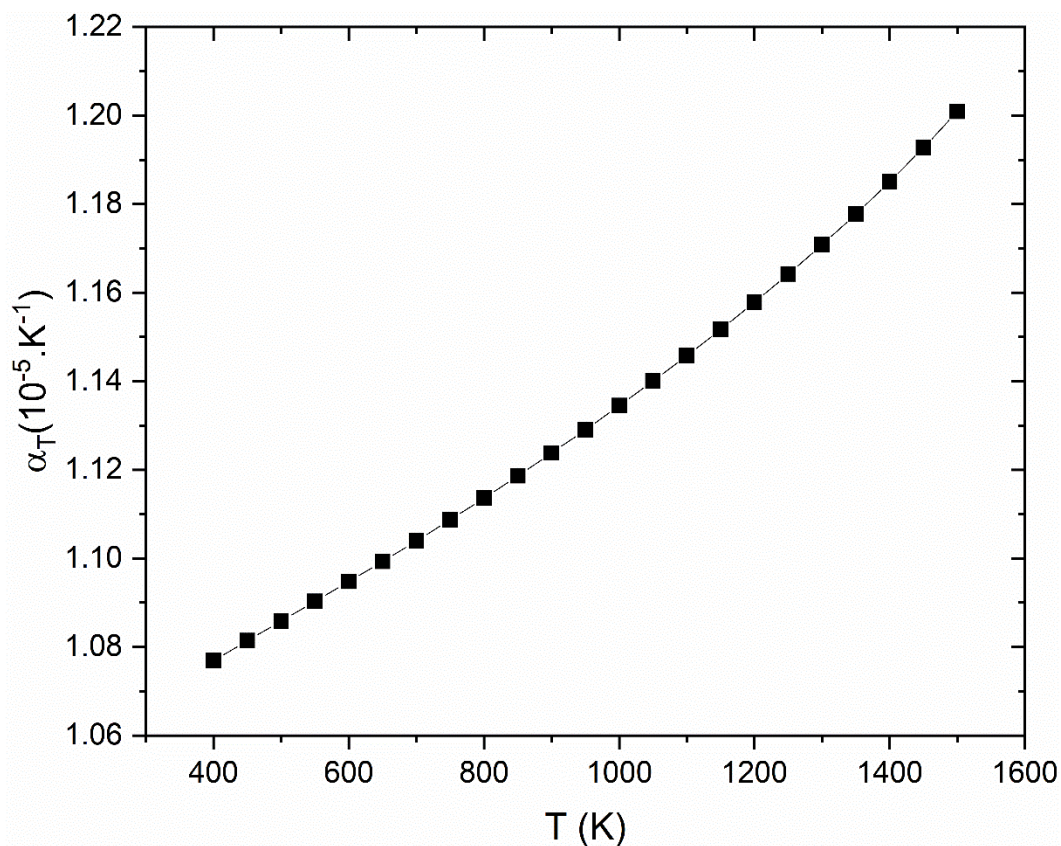


Hình 2.7. Sự thay đổi hằng số mạng của BaTiO_3 theo nhiệt độ ở áp suất $P = 0 \text{ GPa}$.

Tiếp tục áp dụng phương trình (2.46) và (2.48) cho BaTiO_3 , hệ số nở vì nhiệt α_T của BaTiO_3 được tính số và trình bày kết quả trong Hình 2.8.

Chúng ta có thể thấy rằng α_T tăng từ giá trị $1.077 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ đến $1.201 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ khi nhiệt độ tăng từ 400 K đến 1500 K. Sự thay đổi của α_T với nhiệt độ liên hệ tới sự thay đổi không tuyến tính của tham số mạng của BaTiO_3 với nhiệt độ. Kết quả này cho thấy sự dẫn nở vì nhiệt của khối bát diện TiO_6 trong tinh thể BaTiO_3 lập phương khi nhiệt độ thay đổi. Trong khoảng nhiệt độ tính toán, giá trị hệ số nở dài của BaTiO_3 thay đổi rất ít. Điều đó cho thấy vật

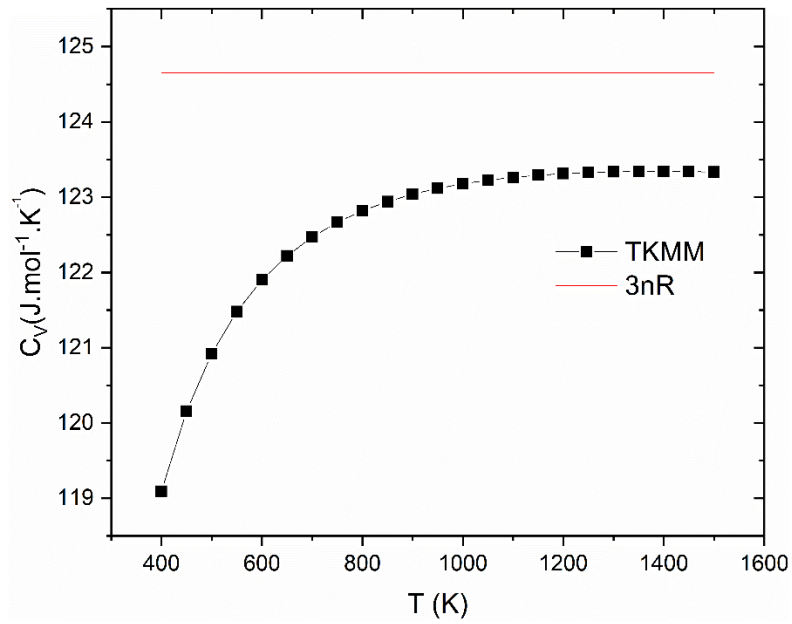
liệu BaTiO₃ ít dẫn nở về nhiệt và không có sự dẫn nở bất thường khi nhiệt độ thay đổi.



Hình 2.8. Sự phụ thuộc nhiệt độ của hệ số nở dài của BaTiO₃ ở áp suất $P = 0 \text{ GPa}$.

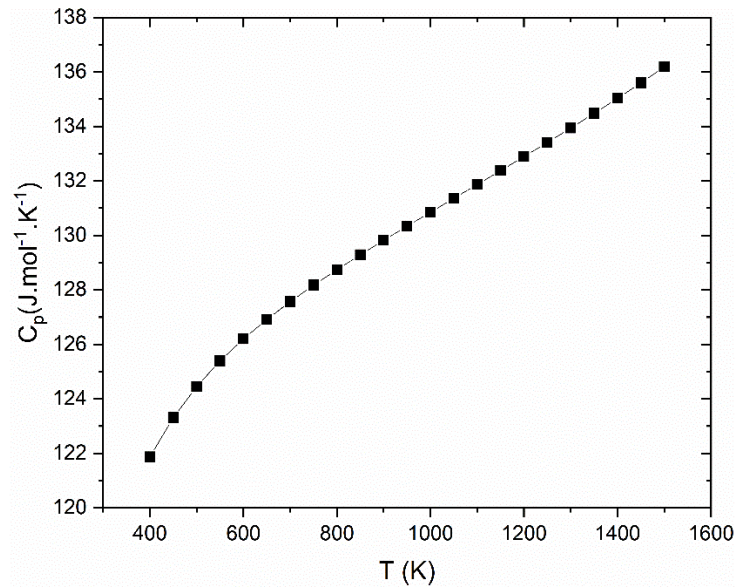
Sử dụng các phương trình (2.50)-(2.56), nhiệt dung đẳng tích của BaTiO₃ được tính số và trình bày kết quả tính toán trong Hình 2.9.

Đồ thị nhiệt dung đẳng tích C_V của BaTiO₃ có phần dốc lớn thể hiện sự thay đổi rất nhiều của nhiệt dung đẳng tích trong vùng nhiệt độ từ 400 K đến khoảng 1000 K. Ở vùng nhiệt độ cao trên 1000 K, nhiệt dung đẳng tích C_V của BaTiO₃ biến đổi chậm và tiệm cận gần hơn với giá trị $3nR$, phù hợp với định luật Dulong Petit cho vùng nhiệt độ cao của nhiều tinh thể.



Hình 2.9. Nhiệt dung đẳng tích C_V của BaTiO_3 ở áp suất $P = 0$ GPa.

Từ giá trị C_V và kết hợp với (2.61), nhiệt dung đẳng áp C_p của BaTiO_3 được tính số từ nhiệt độ 400 K đến 1500 K và kết quả được mô tả trong Hình 2.10.



Hình 2.10. Sự phụ thuộc nhiệt độ của nhiệt dung đẳng áp C_p của BaTiO_3 ở áp suất $P = 0$ GPa.

Đồ thị C_p theo nhiệt độ trong Hình 2.10 là đường cong, thể hiện sự phụ thuộc không tuyến tính của nhiệt dung đẳng áp C_p vào nhiệt độ. Nhiệt dung C_p tăng khi nhiệt độ tăng. Sự phụ thuộc đó là do kể đến các đóng góp của dao động phi điều hòa của nguyên tử trong tinh thể BaTiO₃. Từ nhiệt độ 400 K tới khoảng 600 K, hệ số góc của đường cong $|dC_p / dT|$ có giá trị thay đổi trong khoảng $0.014 - 0.029 (J.mol^{-1}.K^{-2})$. Trong khi đó, ở vùng nhiệt độ lớn hơn 600 K thì hệ số góc của đường cong $|dC_p / dT|$ nhỏ hơn và có giá trị trong khoảng $0.010 - 0.013 (J.mol^{-1}.K^{-2})$. Kết quả này cho thấy nhiệt dung đẳng áp C_p của BaTiO₃ phụ thuộc mạnh vào nhiệt độ ở vùng nhiệt độ thấp, từ 399K đến 600 K, biểu thị bởi đồ thị trong vùng nhiệt độ có độ dốc lớn. Ở vùng nhiệt độ cao, nhiệt dung đẳng áp C_p tăng chậm theo nhiệt độ.

Như vậy, các đại lượng nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite BaTiO₃ như hằng số mạng, hệ số dẫn nhiệt, nhiệt dung đẳng áp, nhiệt dung đẳng tích, đã được tính toán bằng PPTKMM và biểu thức thế năng (2.64). Các kết quả tính toán hằng số mạng có sự phù hợp với thực nghiệm và lí thuyết khác. Sự phù hợp đó đã tiếp tục khẳng định PPTKMM có thể áp dụng hiệu quả nghiên cứu tính chất nhiệt động của vật liệu perovskite BaTiO₃.

Kết luận chương 2

Trong chương này, phương pháp thống kê mô men đã được áp dụng cho nghiên cứu tính chất nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite trong vùng rộng của nhiệt độ. Các biểu thức giải tích của đại lượng nhiệt động như hằng số mạng, hệ số dẫn nở nhiệt, nhiệt dung đẳng áp, nhiệt dung đẳng tích của vật liệu cấu trúc perovskite pha tinh thể lập phương đã thu được khi kể đến hiệu ứng dao động phi điều hòa trong gần đúng khai triển thế năng tương tác đến lũy thừa bậc bốn của độ dời của nguyên tử khỏi vị trí cân bằng nút mạng. Các biểu thức đó giúp tính số các đại lượng nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite tại nhiệt độ T và áp suất $P = 0$ GPa.

Lựa chọn và tối ưu tham số thế phù hợp cho các loại tương tác trong vật liệu perovskite SrTiO_3 và BaTiO_3 , các đại lượng nhiệt động như hằng số mạng, hệ số dẫn nở nhiệt, nhiệt dung đẳng áp, nhiệt dung đẳng tích của các vật liệu đó được tính số. Các kết quả tính toán bằng phương pháp thống kê mô men phù hợp với thực nghiệm và lý thuyết khác trong vùng rộng của nhiệt độ. Sự phù hợp đó đã khẳng định phương pháp thống kê mô men có thể áp dụng hiệu quả nghiên cứu tính chất nhiệt động của vật liệu perovskite SrTiO_3 và BaTiO_3 pha tinh thể lập phương.

CHƯƠNG 3. NGHIÊN CỨU ẢNH HƯỞNG CỦA ÁP SUẤT LÊN TÍNH CHẤT NHIỆT ĐỘNG CỦA VẬT LIỆU CẤU TRÚC PEROVSKITE BẰNG PHƯƠNG PHÁP THỐNG KÊ MÔ MEN

Trong chương này, chúng tôi sẽ xây dựng các biểu thức giải tích cho đại lượng nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite pha tinh thể lập phương ở áp suất khác nhau, có kể đến hiệu ứng dao động phi điều hòa trong gần đúng lũy thừa bậc bốn của độ dời của nguyên tử khỏi vị trí cân bằng nút mạng. Từ các biểu thức đó, chúng tôi tính số các đại lượng nhiệt động của các vật liệu SrTiO₃ và BaTiO₃ pha tinh thể lập phương ở các khoảng áp suất khác nhau. Kết quả tính số được phân tích, so sánh với các kết quả lí thuyết và thực nghiệm khác, rồi đưa ra các kết luận về phương pháp nghiên cứu và ảnh hưởng của áp suất lên tính chất nhiệt động của vật liệu perovskite SrTiO₃ và BaTiO₃.

Kết quả chính của nghiên cứu được công bố trên tạp chí Computational Condensed Matter năm 2022 (là tạp chí thuộc danh mục Web of Science và Scopus (Q3)), Tạp chí Toán Lý VNU Journal of Science: Mathematics – Physics năm 2022 và trình bày trong báo cáo tại Hội nghị Vật lí Việt Nam lần thứ 46 (2021) và 47 (2022).

3.1. Phương trình trạng thái

Áp suất liên hệ với năng lượng tự do Ψ bởi [115]:

$$P = -\left(\frac{\partial \Psi}{\partial V}\right)_T = -\frac{r_1}{3V} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial r_1}\right). \quad (3.1)$$

Ở nhiệt độ $T = 0$ K, năng lượng tự do của vật liệu perovskite có thể xác định theo (2.41) và (2.42). Do đó, phương trình trạng thái của vật liệu perovskite pha tinh thể lập phương ở $T = 0$ K và áp suất P được xây dựng từ (3.1) có dạng:

$$\begin{aligned}
P &= -\frac{5}{24.r_1^2} \left(\frac{\partial \Psi^p}{\partial r_1} \right)_T \\
&= -\frac{5}{24.r_1^2} \left\{ C^A \left[\frac{1}{6} \frac{\partial U_0^A}{\partial r_1} + \frac{\hbar \omega_A}{4k^A} \cdot \frac{\partial k^A}{\partial r_1} \right] + C^B \left[\frac{1}{6} \frac{\partial U_0^B}{\partial r_1} + \frac{\hbar \omega_B}{4k^B} \cdot \frac{\partial k^B}{\partial r_1} \right] + C^X \left[\frac{1}{6} \frac{\partial U_0^X}{\partial r_1} + \frac{\hbar \omega_X}{4k^X} \cdot \frac{\partial k^X}{\partial r_1} \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{3.2}$$

Nghiệm của phương trình (3.2) là giá trị khoảng lân cận gần nhất $r_1^p(P,0)$ giữa hai nguyên tử trong tinh thể cấu trúc perovskite ở áp suất P và nhiệt độ $T = 0$ K. Biết khoảng lân cận gần nhất $r_1^p(P,0)$ ở áp suất P sẽ giúp xác định các đại lượng nhiệt động ở áp suất khác nhau, từ đó có thể phân tích sự phụ thuộc áp suất của các đại lượng nhiệt động đó.

3.2. Các đại lượng nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite ở áp suất khác nhau

Từ nghiệm $r_1^p(P,0)$ của phương trình (3.2) và (2.35) sẽ xác định được các thông số $k^b(P,0)$, $\gamma_1^b(P,0)$, $\gamma_2^b(P,0)$, $\gamma^b(P,0)$ theo (2.35) và (2.11) ở áp suất P . Từ đó xác định độ dời $y_0^b(P,T)$ ở áp suất P và nhiệt độ T của nguyên tử b khỏi vị trí cân bằng nút mạng trong tinh thể cấu trúc perovskite có dạng:

$$y_0^b(P,T) = \sqrt{\frac{2\gamma^b(P,0)\theta^2}{3(k^b(P,0))^3} A^b(P,0)}. \tag{3.3}$$

Từ (3.3) và (2.25) ta xác định được độ dời trung bình của nguyên tử khỏi vị trí cân bằng nút mạng trong tinh thể cấu trúc perovskite có dạng:

$$\overline{y_0^p(P,T)} = C^A \cdot y_0^A(P,T) + C^B \cdot y_0^B(P,T) + C^X \cdot y_0^X(P,T). \tag{3.4}$$

Kết hợp (2.26) với (3.4) ta được khoảng lân cận gần nhất $r_1^p(P,T)$ ở áp suất P và nhiệt độ T giữa các nguyên tử trong tinh thể perovskite

$$r_1^p(P,T) = r_1^p(P,0) + \overline{y_0^p(P,T)}. \tag{3.5}$$

Sau khi nhận được $r_1^p(P, T)$, chúng ta có thể tính hằng số mạng ở áp suất P và nhiệt độ T của vật liệu perovskite pha tinh thể lập phương bởi liên hệ sau

$$a_c^p(P, T) = 2r_1^p(P, T). \quad (3.6)$$

Kết hợp (3.3) và (2.45) sẽ thu được hệ số nở vì nhiệt riêng phần của các nguyên tử b trong tinh thể perovskite ở áp suất P và nhiệt độ T dưới dạng:

$$\alpha_T^b(P, T) = \frac{k_B}{r_1(P, 0)} \frac{\partial y^b(P, T)}{\partial \theta}. \quad (3.7)$$

Từ biểu thức xác định độ dãn $y^b(P, T)$ ở nhiệt độ T và áp suất P , biểu thức (3.7) có thể viết ở dạng:

$$\alpha_T^b(P, T) = \frac{y^b(P, T)}{r_1(P, 0)} \left(1 + \frac{\theta}{2A^b(P, T)} \cdot \frac{dA^b(P, T)}{d\theta} \right). \quad (3.8)$$

Kết hợp (3.7), (3.8), (3.4) và (2.46) dễ dàng xác định hệ số nở vì nhiệt của vật liệu perovskite ở nhiệt độ T và áp suất P :

$$\alpha_T^p(P, T) = C^A \alpha_T^A(P, T) + C^B \alpha_T^B(P, T) + C^X \alpha_T^X(P, T). \quad (3.9)$$

Khi áp dụng (3.5) vào (2.56) giúp xác định được nhiệt dung đẳng áp riêng phần của các nguyên tử b ($b = A, B, X$) ở áp suất P và nhiệt độ T trong vật liệu perovskite:

$$C_V^A(P, T) = 3N^A k_B \left\{ \frac{x_A^2}{\sinh^2 x_A} + \frac{2\theta}{(k^A)^2} \left[\left(2\gamma_2^A + \frac{\gamma_1^A}{3} \right) \frac{x_A^3 \coth x_A}{\sinh^2 x_A} + \frac{\gamma_1^A}{3} \left(1 + \frac{x_A^2}{\sinh^2 x_A} \right) - \gamma_2^A \left(\frac{x_A^4}{\sinh^4 x_A} + \frac{2x_A^4 \coth^2 x_A}{\sinh^2 x_A} \right) \right] \right\};$$

$$C_V^B(P, T) = 3N^B k_B \left\{ \frac{x_B^2}{\sinh^2 x_B} + \frac{2\theta}{(k^B)^2} \left[\left(2\gamma_2^B + \frac{\gamma_1^B}{3} \right) \frac{x_B^3 \coth x_B}{\sinh^2 x_B} + \frac{\gamma_1^B}{3} \left(1 + \frac{x_B^2}{\sinh^2 x_B} \right) - \gamma_2^B \left(\frac{x_B^4}{\sinh^4 x_B} + \frac{2x_B^4 \coth^2 x_B}{\sinh^2 x_B} \right) \right] \right\};$$

$$C_V^X(P, T) = 3N^X k_B \left\{ \frac{x_X^2}{\sinh^2 x_X} + \frac{2\theta}{(k^X)^2} \left[\left(2\gamma_2^X + \frac{\gamma_1^X}{3} \right) \frac{x_X^3 \coth x_X}{\sinh^2 x_X} + \frac{\gamma_1^X}{3} \left(1 + \frac{x_X^2}{\sinh^2 x_X} \right) - \gamma_2^X \left(\frac{x_X^4}{\sinh^4 x_X} + \frac{2x_X^4 \coth^2 x_X}{\sinh^2 x_X} \right) \right] \right\}. \quad (3.10)$$

Sử dụng (3.10) và (2.54) ta có biểu thức xác định nhiệt dung đẳng tích của vật liệu perovskite phụ thuộc áp suất P và nhiệt độ T dưới dạng

$$C_V^P(P, T) = C^A \cdot C_V^A(P, T) + C^B \cdot C_V^B(P, T) + C^X \cdot C_V^X(P, T). \quad (3.11)$$

Từ giá trị nhiệt dung đẳng tích C_V^P tính theo (3.11), ta có thể tính giá trị nhiệt dung đẳng áp C_P^P khi biết hệ số nén đẳng nhiệt χ_T^P .

Vận dụng (2.57) cho tinh thể cấu trúc perovskite pha lập phương, hệ số nén đẳng nhiệt χ_T được xác định bởi:

$$\chi_T = - \left(\frac{r_1(P, T)}{r_1(P, 0)} \right)^3 \cdot \frac{3}{r_1(P, T) \cdot \left(\frac{\partial P}{\partial r_1} \right)_T}. \quad (3.12)$$

Mặt khác áp suất P được xác định qua năng lượng tự do Ψ bởi:

$$P = - \left(\frac{\partial \Psi}{\partial V} \right)_T = - \frac{r_1(P, T)}{3V} \cdot \left(\frac{\partial \Psi}{\partial r_1} \right)_T. \quad (3.13)$$

Thay (3.13) vào (3.12), hệ số nén đẳng nhiệt χ_T^P của vật liệu cấu trúc perovskite pha tinh thể lập phương được tính theo biểu thức:

$$\chi_T^p(P, T) = \frac{3 \left(\frac{r_1^p(P, T)}{r_1^p(P, 0)} \right)^3}{2P + \frac{(r_1^p(P, T))^3}{3V(P, T)} \left(\frac{\partial^2 \Psi^p}{\partial r_1^2} \right)_T}. \quad (3.14)$$

Biểu thức (3.14) giúp ta tính hệ số nén đẳng nhiệt χ_T^p ở nhiệt độ T và áp suất khác nhau.

Hệ số nén đẳng nhiệt χ_T^p , nhiệt dung đẳng tích C_V^p và nhiệt dung đẳng áp C_P^p ở áp suất P và nhiệt độ T có mối liên hệ sau:

$$C_P^p(P, T) = C_V^p(P, T) + \frac{9TV(\alpha_T^p(P, T))^2}{\chi_T^p(P, T)}. \quad (3.15)$$

Biểu thức (3.15) cho phép tính giá trị nhiệt dung đẳng áp C_P^p của vật liệu perovskite pha tinh thể lập phương ở nhiệt độ và áp suất khác nhau.

Như vậy, chúng ta có thể xác định các đại lượng nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite pha tinh thể lập phương ở nhiệt độ và áp suất khác nhau. Thông qua giá trị số tính được sẽ cho thấy ảnh hưởng, tác động của nhiệt độ và áp suất đối với các đại lượng nhiệt động.

3.3. Kết quả tính số cho một số vật liệu cấu trúc perovskite

3.3.1. Ảnh hưởng của áp suất lên tính chất nhiệt động của SrTiO₃

Để nghiên cứu ảnh hưởng của áp suất lên tính chất nhiệt động của SrTiO₃, các biểu thức thu được bằng phương pháp thống kê mô men như trình bày ở phần trước tiếp tục được sử dụng. Từ kết quả thu được sẽ cho thấy được sự ảnh hưởng của áp suất lên tính chất nhiệt động của SrTiO₃.

Dưới ảnh hưởng của áp suất và nhiệt độ, SrTiO₃ sẽ thay đổi cấu trúc pha tinh thể từ hệ lập phương ($Pm\bar{3}m$) sang hệ tứ giác ($I4/mcm$), từ hệ tứ giác ($I4/mcm$) sang hệ trực giao ($Cmcm$) [37], [40]. Khi ở hệ lập phương tinh thể,

SrTiO₃ sẽ chuyển sang hệ tứ giác ở những điều kiện áp suất và nhiệt độ tương ứng, như ở 9,6 GPa và nhiệt độ phòng, ở áp suất 15 GPa và 381 K, ở 18,7 GPa và 467 K [37]. Điều đó cho thấy, trong vùng áp suất từ 0 GPa đến 9,4 GPa ở các nhiệt độ 298 K, 381 K và 464 K thì SrTiO₃ có cấu trúc tinh thể lập phương với nhóm đối xứng *Pm3m*. Do đó, các vùng nhiệt độ và áp suất này được chọn để tính số các đại lượng nhiệt động của SrTiO₃ cấu trúc tinh thể lập phương, rồi so sánh với kết quả thực nghiệm và lý thuyết đã có.

Tương tự trong chương 2, áp dụng biểu thức thế năng tương tác cặp (2.64) và các tham số thế cho SrTiO₃ trong Bảng 2.1, các đại lượng nhiệt động của SrTiO₃ ở nhiệt độ T và áp suất P khác nhau được tính số với sự trợ giúp của phần mềm Mapple.

Hằng số mạng của SrTiO₃ ở 1atm và nhiệt độ phòng có giá trị là 3.90507Å và được trình bày trong Bảng 3.1 cùng với sự so sánh với thực nghiệm và tính toán khác.

Bảng 3.1. Hằng số mạng của SrTiO₃ cấu trúc lập phương ở áp suất $P = 1 \text{ atm}$ và nhiệt độ phòng.

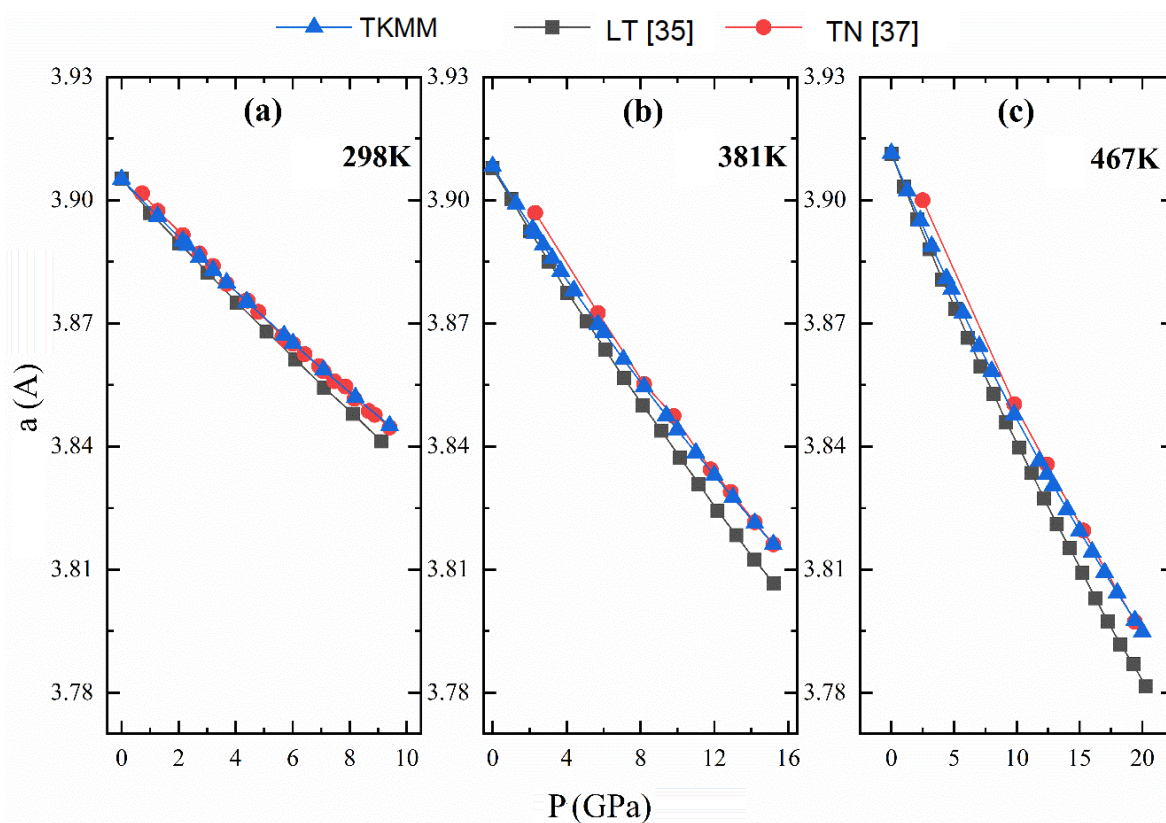
	TKMM	Thực nghiệm	Lý thuyết
a (Å)	3.90507	3.9051 [24]	3.90516 [35]

Kết quả tính toán có sự phù hợp tốt với giá trị thực nghiệm [24] và tính toán khác [35]. Kết quả này chỉ ra sự phù hợp trong tính toán tính chất nhiệt động của SrTiO₃ bằng phương pháp thống kê mô men ở áp suất $P \neq 0 \text{ GPa}$ khi sử dụng các tham số thế Bảng 2.1.

Để xét ảnh hưởng của áp suất lên hằng số mạng của SrTiO₃, trước tiên sử dụng phương trình (3.2) để xác định khoảng lân cận gần nhất, sau đó xác định hằng số mạng theo phương trình (3.6) ở một số nhiệt độ và áp suất khác

nhau. Giá trị hằng số mạng trong vùng rộng của áp suất được tính toán ở các nhiệt độ 298 K, 381 K và 467 K và được trình bày trong Hình 3. 1.

So sánh với thực nghiệm và lí thuyết khác chỉ ra trong đồ thị Hình 3. 1 cho thấy, giá trị tính toán hằng số mạng của SrTiO₃ tính toán bằng PPTKMM phù hợp tốt với kết quả thực nghiệm [37] và tính toán lí thuyết [35] trong vùng rộng của nhiệt độ và áp suất. Hơn nữa, đồ thị tính toán bằng PPTKMM có giá trị gần kết quả thực nghiệm [37] hơn kết quả tính toán từ lí thuyết động lực học phân tử [35].

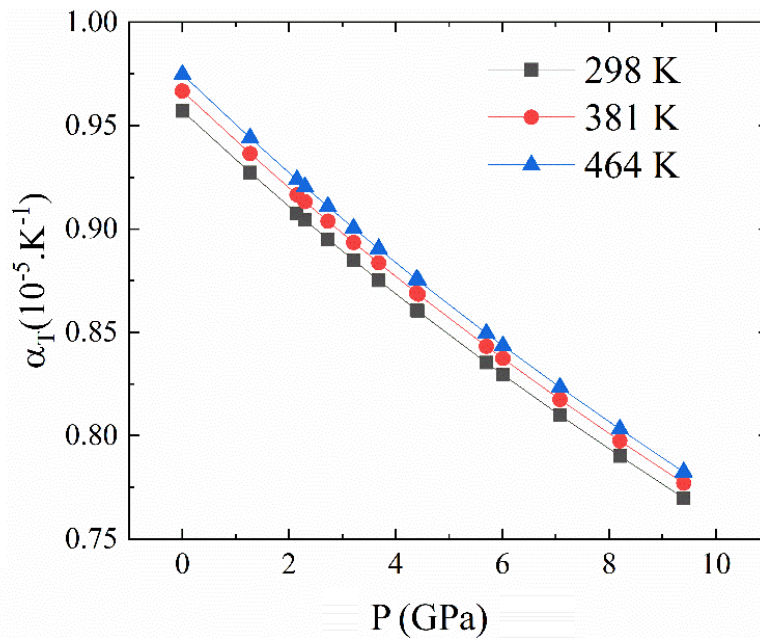


Hình 3. 1. Sự thay đổi hằng số mạng của SrTiO₃ theo áp suất ở các nhiệt độ 298 K (a), 381 K (b) và 467 K (c).

Đồ thị Hình 3. 1 cũng chỉ ra sự giảm của hằng số mạng khi áp suất tăng, hay hằng số mạng của SrTiO₃ là hàm giảm của áp suất. Kết quả này có thể giải thích bởi sự giảm các dao động của nguyên tử nút mạng trong SrTiO₃ khi áp

suất tăng. Kể đến sự thay đổi của nhiệt độ từ 298 K đến 464 K, cho thấy sự tăng của hằng số mạng. Khi nhiệt độ tăng, các nguyên tử nút mạng dao động mạnh hơn nên làm tăng khoảng cách giữa chúng, hay làm tăng hằng số mạng tinh thể SrTiO₃. Hằng số mạng là hàm tăng của nhiệt độ. Như vậy, hằng số mạng của SrTiO₃ chịu tác động của áp suất và nhiệt độ theo hai hướng ngược nhau.

Từ kết quả hằng số mạng, sử dụng (3.8) và (3.9) cho phép tính giá trị hệ số nở dài của SrTiO₃ trong vùng rộng của áp suất từ 1 atm đến 9.4 GPa và ở các nhiệt độ 298 K, 381 K và 464 K. Các giá trị số của hệ số nở dài của SrTiO₃ tại áp suất và nhiệt độ khác nhau được trình bày trong Hình 3. 2.

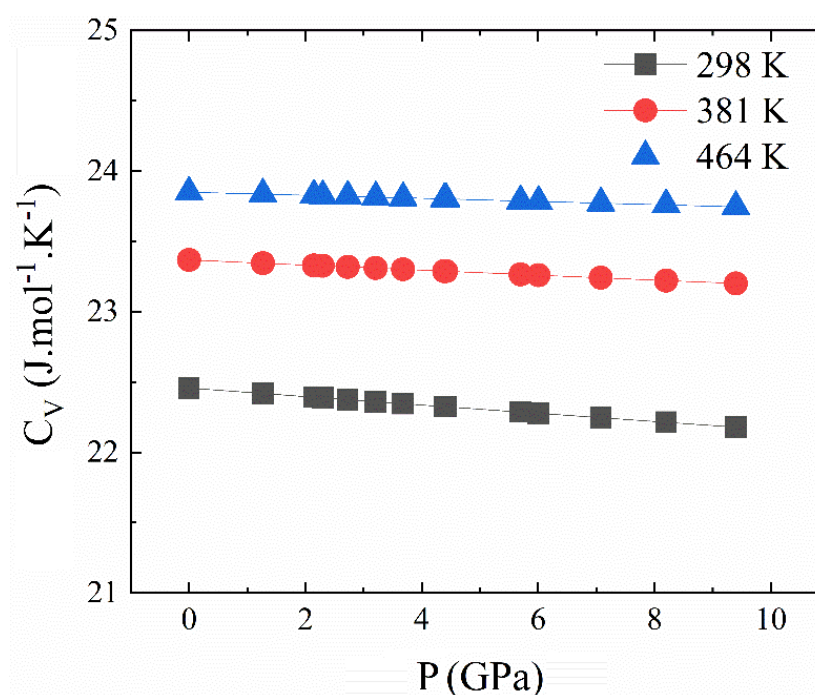


Hình 3. 2. Sự phụ thuộc áp suất của hệ số nở dài của SrTiO₃ ở nhiệt độ 298 K, 381 K và 464K.

Như quan sát trong Hình 3. 2 cho thấy, đồ thị hệ số nở dài của SrTiO₃ là đường cong đi xuống khi áp suất tăng. Hệ số góc đồ thị $|d\alpha_T / dP|$ nhận giá trị trong khoảng $|d\alpha_T / dP| \approx 0.017 - 0.023(10^{-5} . K^1 / GPa)$. Điều đó chỉ ra hệ số nở dài của SrTiO₃ là hàm giảm của áp suất. Kết quả phù hợp với sự thay đổi chậm của hằng số mạng ở vùng áp suất cao.

Tuy vậy, Hình 3. 2 cũng chỉ ra sự tăng của hệ số nở dài của SrTiO₃ khi nhiệt độ tăng từ 298 K đến 464 K. Sự thay đổi này phản ánh sự phụ thuộc không tuyến tính của hằng số mạng của SrTiO₃ vào nhiệt độ.

Nhiệt dung đẳng tích C_V được tính toán từ sử dụng các biểu thức (3.10) và (3.11). Giá trị số cho nhiệt dung C_V ở các áp suất từ 1 atm đến 9.4 GPa tương ứng ở nhiệt độ 298 K, 381 K và 464 K và được trình bày trong Hình 3.3.

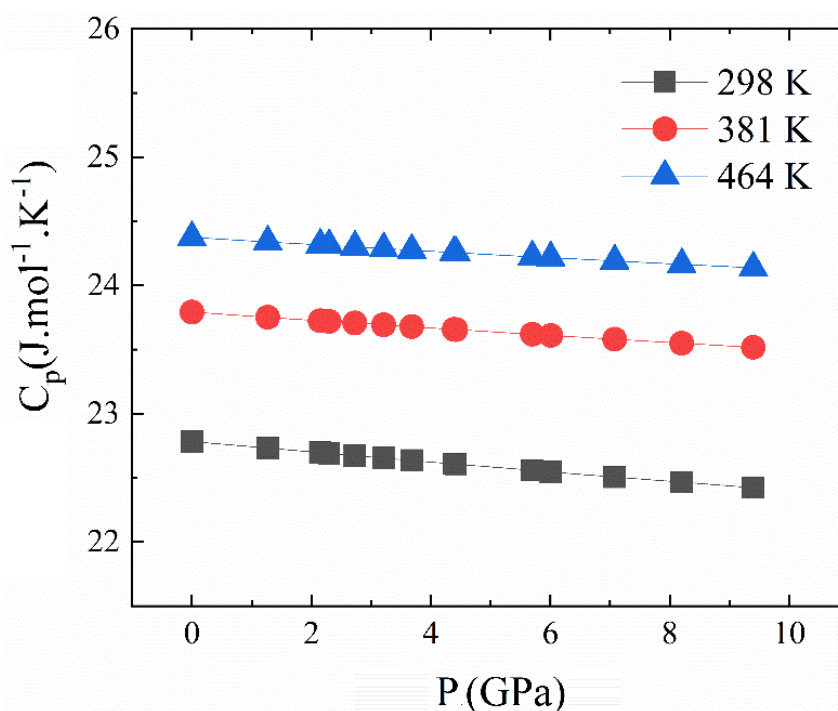


Hình 3.3. Sự phụ thuộc của nhiệt dung đẳng tích C_V của SrTiO₃ vào áp suất ở các nhiệt độ 298 K, 381 K và 464 K.

Chúng ta có thể thấy trong Hình 3.3, đồ thị C_V gần như nằm ngang khi áp suất thay đổi từ 1 atm tới 9.4 atm. Đồ thị đã chỉ ra sự thay đổi rất nhỏ của nhiệt dung đẳng tích khi áp suất thay đổi. Như vậy, áp suất ít ảnh hưởng đến nhiệt dung đẳng tích C_V của SrTiO₃. Hệ số góc $|dC_V / dP|$ của đồ thị có giá trị

thay đổi trong khoảng $|dC_v / dP| \approx 0.011 - 0.030 (J.mol^{-1}.K^{-1} / GPa)$ và được trình bày trong Bảng 3.2.

Sử dụng (3.15) cho phép tính được giá trị nhiệt dung đẳng áp C_p ở nhiệt độ 298 K, 381 K và 464 K, tính trong khoảng áp suất từ 1 atm đến 9.4 GPa. Giá trị tính số cho nhiệt dung đẳng áp C_p của SrTiO₃ được trình bày trong Hình 3.4.



Hình 3.4. Sự phụ thuộc áp suất của nhiệt dung đẳng áp C_p của SrTiO₃ ở nhiệt độ 298 K, 381 K và 464 K.

Các đường đồ thị trong Hình 3.4 là đường đi xuống, điều đó cho thấy nhiệt dung đẳng áp C_p của SrTiO₃ là hàm giảm của áp suất. Sự đi xuống của đồ thị không nhiều cho thấy sự ảnh hưởng nhỏ của áp suất lên nhiệt dung đẳng áp của SrTiO₃. Hệ số góc $|dC_p / dP|$ của đồ thị có giá trị thay đổi trong khoảng $|dC_p / dP| \approx 0.023 - 0.041 (J.mol^{-1}.K^{-1} / GPa)$ và được trình bày trong bảng Bảng 3.2.

Bảng 3.2. Hệ số góc của đường cong nhiệt dung đẳng tích C_V và đẳng áp C_p của SrTiO₃ ở nhiệt độ 298 K, 381 K và 464 K.

	298 K	381 K	464 K
Hệ số $ dC_V / dP $ ($J.mol^{-1}.K^{-1} / GPa$)	0.0288 – 0.0304	0.0175 - 0.0180	0.0109 - 0.0111
Hệ số $ dC_p / dP $ ($J.mol^{-1}.K^{-1} / GPa$)	0.0361 - 0.0410	0.0271- 0.0318	0.0230 - 0.0280

Hình 3.3 và Hình 3.4 cho thấy, khi nhiệt độ tăng từ 298 K tới 464 K cả nhiệt dung đẳng tích và đẳng áp của SrTiO₃ đều tăng. Hơn nữa, C_V và C_p thay đổi ở vùng nhiệt độ thấp nhiều hơn ở vùng nhiệt độ cao. Từ Bảng 3.2 cho thấy, khi kể đến ảnh hưởng của áp suất, các giá trị hệ số góc của đường cong C_V và C_p đều giảm chậm khi áp suất tăng.

Các Hình 3. 1 ÷ 3.4 chỉ ra sự thay đổi hệ số góc của đường cong và sự phụ thuộc là không tuyến tính. Sự thay đổi của hệ số góc này là hệ quả của sự tồn tại các dao động phi điều hòa của nguyên tử trong tinh thể perovskite SrTiO₃ và được tính đến thông qua các số hạng phi điều hòa trong biểu thức giải tích của đại lượng nhiệt động. Trên các hình đó cũng cho thấy rằng, hằng số mạng, hệ số nở dài α_T , nhiệt dung đẳng tích C_V và đẳng áp C_p đều giảm khi áp suất tăng và tăng với sự tăng của nhiệt độ.

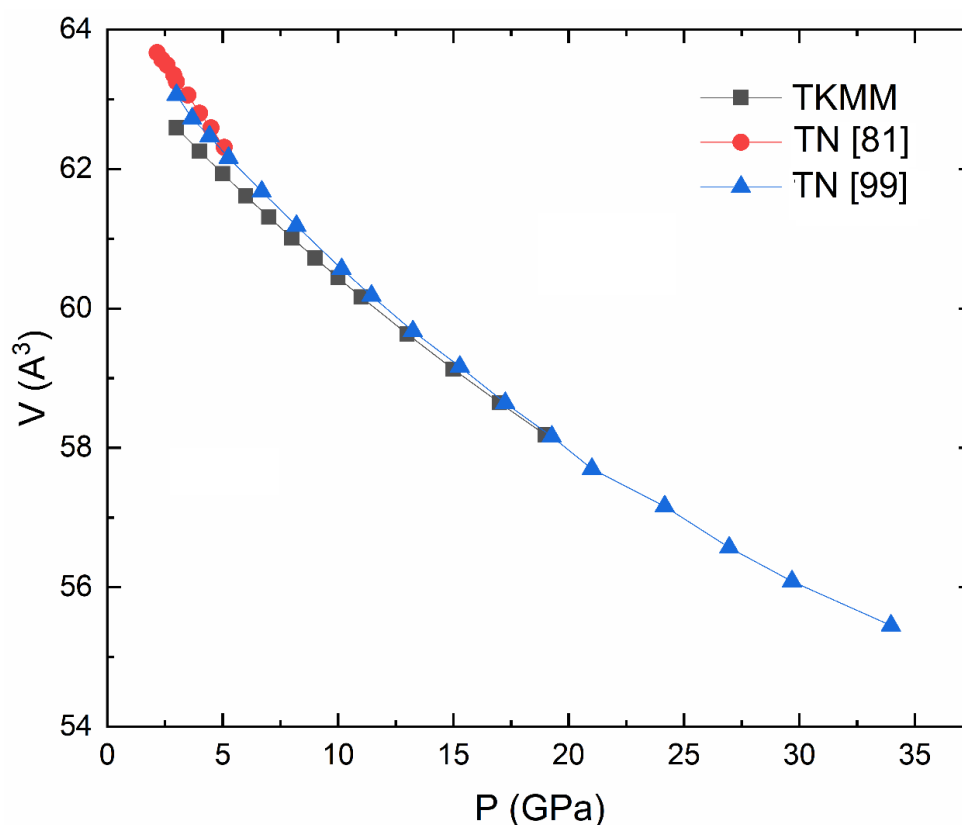
Như vậy, luận án đã áp dụng phương pháp thống kê mô men nghiên cứu sự phụ thuộc áp suất lên tính chất nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite như SrTiO₃ trong vùng rộng của nhiệt độ. Hơn nữa, biểu thức thế năng tương tác (2.64) cho kết quả tính số với SrTiO₃ phù hợp khá tốt với thực nghiệm và lí thuyết khác. Kết quả đó khẳng định sự hiệu quả của phương pháp thống kê mô men trong nghiên cứu ảnh hưởng của áp suất lên tính chất nhiệt động của vật liệu perovskite SrTiO₃.

3.3.2. Ảnh hưởng của áp suất lên tính chất nhiệt động của BaTiO₃

Khi áp suất và nhiệt độ thay đổi, BaTiO₃ sẽ thay đổi cấu trúc pha tinh thể từ hệ thoi (R3m) → hệ trục giao (I4/mcm) → hệ trục giao (Amm2) → hệ tứ giác (P4mm) → Hệ lập phương (*Pm3m*) [54] [109]. Khi ở hệ lập phương tinh thể, BaTiO₃ sẽ chuyển sang hệ tứ giác ở những điều kiện áp suất và nhiệt độ tương ứng, như ở 0 GPa và 393 K, ở áp suất 2,5 GPa và 300 K, và từ 400 K → 1200 K thì BaTiO₃ luôn có pha tinh thể lập phương [54]. Điều đó cho thấy, trong vùng áp suất từ 3 GPa đến 19 GPa ở nhiệt độ 300 K và trong vùng áp suất từ 0,5 GPa → 19 GPa ở 400 K, 500 K, 600 K, 800 K và 1200 K thì BaTiO₃ có cấu trúc tinh thể lập phương với nhóm đối xứng *Pm3m*. Do đó, các vùng nhiệt độ và áp suất này được chọn để tính số các đại lượng nhiệt động của BaTiO₃ cấu trúc tinh thể lập phương, rồi so sánh với kết quả thực nghiệm và lý thuyết đã có.

Tiếp tục áp dụng biểu thức thế tương tác cặp (2.64) với các tham số thế cho BaTiO₃ trong Bảng 2.2 và các biểu thức thu được trong chương 3, các đại lượng nhiệt động của BaTiO₃ ở nhiệt độ T và áp suất P khác nhau sẽ được tính số với sự trợ giúp của phần mềm Mapple.

Trong các kết quả tính toán và thực nghiệm về chuyển pha cấu trúc của BaTiO₃ đã chỉ ra, BaTiO₃ có cấu trúc lập phương ở nhiệt độ 300 K trong vùng áp suất từ 3 GPa [53], [54], [84], [103], [109]. Do đó, phương trình (3.2) được sử dụng cho vật liệu perovskite BaTiO₃ cấu trúc lập phương để xác định khoảng lân cận gần nhất, sau đó xác định hằng số mạng theo phương trình (3.6) ở một số nhiệt độ và áp suất khác nhau. Giá trị hằng số mạng của BaTiO₃ trong vùng rộng của áp suất từ 3 GPa đến 19 GPa được tính toán ở nhiệt độ 300 K và được trình bày trong Hình 3.5, cùng với sự so sánh với thực nghiệm và tính toán khác.



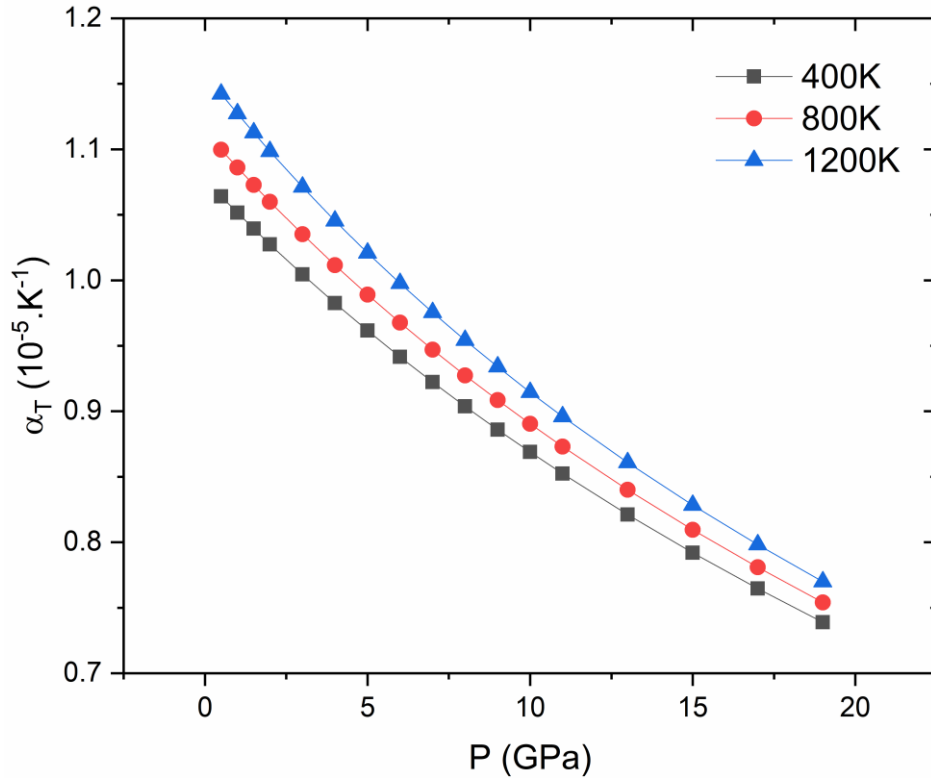
Hình 3.5. Sự phụ thuộc áp suất của thể tích của BaTiO₃ ở nhiệt độ 300 K.

Sự so sánh với thực nghiệm chỉ ra trong đồ thị Hình 3.5 cho thấy, giá trị tính toán hằng số mạng của BaTiO₃ bằng PPTKMM phù hợp tốt với kết quả thực nghiệm [81], [99]. Sự phù hợp này tiếp tục khẳng định sự lựa chọn tham số thể cho BaTiO₃ trình bày trong Bảng 2.2 là phù hợp khi nghiên cứu tính chất nhiệt động khác của BaTiO₃.

Hình 3.5 cũng chỉ ra một đồ thị giảm của thể tích khi áp suất tăng, hay hằng số mạng của BaTiO₃ là hàm giảm của áp suất. Kết quả này có thể giải thích bởi sự giảm các dao động của nguyên tử nút mạng trong BaTiO₃ khi áp suất tăng.

Từ kết quả hằng số mạng, sử dụng (3.9) các giá trị tính số của hệ số nở dài của BaTiO₃ được tính toán trong vùng rộng của áp suất từ 0.5 GPa đến

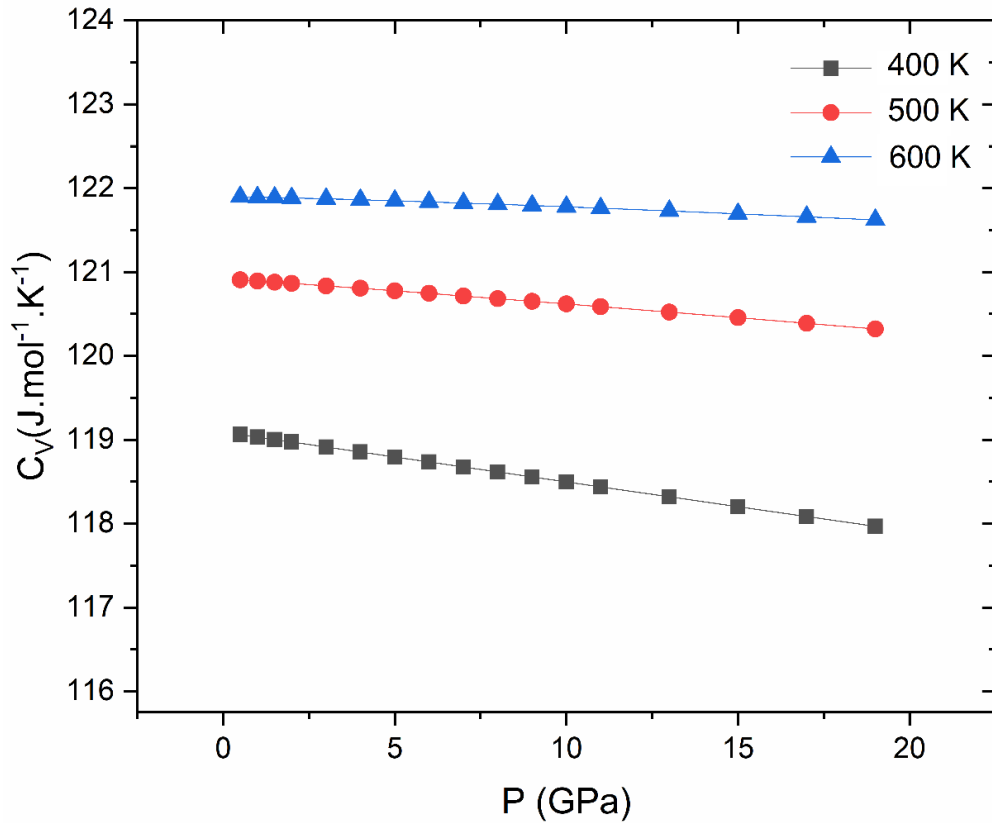
19 GPa và ở các nhiệt độ 400 K, 800 K và 1200 K. Các giá trị số của hệ số nở dài của BaTiO₃ tại áp suất và nhiệt độ khác nhau được trình bày trong Hình 3.6.



Hình 3.6. Sự phụ thuộc áp suất của hệ số nở dài của BaTiO₃ ở 400 K, 800 K và 1200 K.

Như quan sát trong Hình 3.6 cho thấy đồ thị hệ số nở dài của BaTiO₃ là đường cong đi xuống khi áp suất tăng. Hệ số góc đồ thị $|d\alpha_T / dP|$ nhận giá trị trong khoảng $|d\alpha_T / dP| \approx 0.013 - 0.044 (10^{-5} \cdot K^1 / GPa)$. Điều đó chỉ ra hệ số nở dài của BaTiO₃ là hàm giảm của áp suất. Kết quả phù hợp với sự thay đổi chậm của hằng số mạng ở vùng áp suất cao.

Tuy vậy, Hình 3.6 cũng chỉ ra sự tăng của hệ số nở dài của BaTiO₃ khi nhiệt độ tăng từ 400 K đến 1200 K. Sự thay đổi này phản ánh sự phụ thuộc không tuyến tính của hằng số mạng của BaTiO₃ vào nhiệt độ.

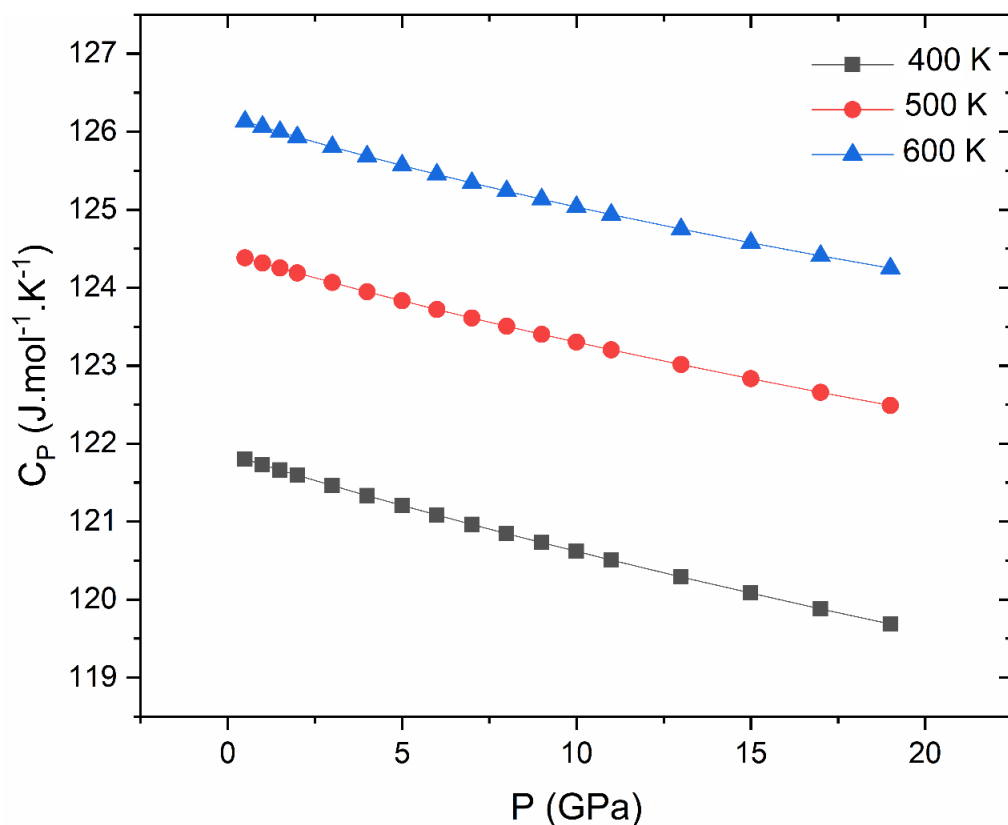


Hình 3.7. Sự phụ thuộc áp suất của nhiệt dung đẳng tích C_V của BaTiO_3 ở nhiệt độ 400 K, 500 K và 600 K.

Tương tự trường hợp SrTiO_3 , giá trị nhiệt dung đẳng tích C_V của BaTiO_3 ở áp suất và nhiệt độ khác nhau được tính toán từ phương trình (3.10) và (3.11). Giá trị tính số thu được của C_V ở các áp suất từ 0.5 GPa đến 19 GPa tương ứng tại nhiệt độ 400 K, 500 K và 600 K được trình bày trong Hình 3.7.

Chúng ta có thể thấy trong Hình 3.7, các đồ thị C_V gần như nằm ngang khi áp suất thay đổi từ 0.5 GPa tới 19 GPa. Đồ thị đã chỉ ra sự thay đổi rất nhỏ của nhiệt dung đẳng tích khi áp suất thay đổi trong vùng nhiệt độ 400 K, 500 K và 600 K. Hay áp suất ít ảnh hưởng đến nhiệt dung đẳng tích C_V của BaTiO_3 . Hệ số góc $|dC_V/dP|$ của đồ thị có giá trị thay đổi trong khoảng

$|dC_V / dP| \approx 0.0084 - 0.0593(J.mol^{-1}.K^{-1} / GPa)$ và được trình bày trong Bảng 3.3.



Hình 3.8. Sự thay đổi của nhiệt dung đẳng áp của BaTiO₃ theo áp suất ở nhiệt độ 400 K, 500 K và 600 K.

Sử dụng phương trình (3.15), giá trị tính số nhiệt dung đẳng áp C_p của BaTiO₃ ở nhiệt độ 400 K, 500 K và 600 K, tính trong khoảng áp suất từ 0.5 GPa đến 19 GPa và được trình bày trong Hình 3.8.

Các đường đồ thị trong Hình 3.8 là đường đi xuống, điều đó cho thấy nhiệt dung đẳng áp C_p của BaTiO₃ là hàm giảm của áp suất. Sự đi xuống của đồ thị không nhiều chứng tỏ sự ảnh hưởng nhỏ của áp suất lên nhiệt dung đẳng áp của BaTiO₃. Hệ số góc $|dC_p / dP|$ của đồ thị có giá trị thay đổi trong khoảng

$|dC_p / dP| \approx 0.023 - 0.041 (J.mol^{-1}.K^{-1} / GPa)$ và được trình bày trong Bảng 3.3.

Hình 3.7 và Hình 3.8 cho thấy, khi nhiệt độ tăng từ 400 K tới 600 K cả nhiệt dung đẳng tích và đẳng áp của BaTiO₃ đều tăng. Ngoài ra, kể đến ảnh hưởng của áp suất, các giá trị hệ số góc trong Bảng 3.2 và Bảng 3.3 cho thấy C_V và C_p đều giảm chậm khi áp suất tăng.

Bảng 3.3. Hệ số góc của đường cong nhiệt dung đẳng tích C_V và đẳng áp C_p của BaTiO₃ ở nhiệt độ 400 K, 500 K và 600 K.

	400 K	500 K	600 K
Hệ số $ dC_V / dP $ ($J.mol^{-1}.K^{-1} / GPa$)	0.0583 – 0.0593	0.0279 - 0.0335	0.0084 - 0.0187
Hệ số $ dC_p / dP $ ($J.mol^{-1}.K^{-1} / GPa$)	0.0361 - 0.0410	0.0271- 0.0318	0.0230 - 0.0280

Hơn nữa, các đồ thị trên Hình 3.6 – 3.8 biểu diễn sự thay đổi hệ số góc của đường cong, tức là C_p và C_V phụ thuộc không tuyến tính vào áp suất. Sự thay đổi của hệ số góc này là hệ quả của sự tồn tại các dao động phi điều hòa của nguyên tử trong tinh thể perovskite BaTiO₃. Các dao động đó được tính đến bởi phương pháp thống kê mô men thông qua các số hạng phi điều hòa được kể đến trong biểu thức giải tích của đại lượng nhiệt động của BaTiO₃. Các hình đó cũng chỉ ra rằng, thể tích, hệ số nở dài α_T , nhiệt dung đẳng tích C_V và đẳng áp C_p đều giảm khi áp suất tăng và tăng với sự tăng của nhiệt độ.

Kết luận chương 3

Phương pháp thống kê mô men đã được áp dụng để nghiên cứu sự phụ thuộc áp suất của các đại lượng nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite. Các biểu thức giải tích cho các đại lượng nhiệt động của vật liệu perovskite pha tinh thể lập phương ở áp suất khác nhau được xây dựng khi kể đến hiệu ứng dao động phi điều hòa của các nguyên tử. Các biểu thức đó giúp tính số đại lượng nhiệt động của vật liệu tại áp suất khác nhau.

Kết quả tính số cho SrTiO_3 và BaTiO_3 được phân tích, so sánh với các kết quả nghiên cứu lí thuyết và thực nghiệm khác. Kết quả tính toán bằng phương pháp thống kê mô men có sự phù hợp với kết quả lí thuyết và thực nghiệm khác.

KẾT LUẬN

Luận án đã sử dụng phương pháp thông kê mô men để nghiên cứu tính chất nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite. Kết quả thu được có tính mới và được công bố trên tạp chí khoa học trong và ngoài nước. Các kết quả chính của luận án gồm:

+ Đã thu được các biểu thức giải tích của năng lượng tự do Helmholtz, phương trình trạng thái, độ dãn của nguyên tử khỏi vị trí cân bằng nút mạng, hằng số mạng, hệ số dẫn nở nhiệt, hệ số nén đẳng nhiệt, nhiệt dung đẳng tích, nhiệt dung đẳng áp của vật liệu cấu trúc perovskite pha tinh thể lập phương khi kể đến hiệu ứng dao động phi điều hòa của các nguyên tử nút mạng.

Để thực hiện tính số cho vật liệu perovskite SrTiO_3 và BaTiO_3 , luận án sử dụng biểu thức thế năng tương tác cặp (2.64) giữa các ion, có tham số thế năng tương tác được lựa chọn và tối ưu phù hợp mô tả cho cả ba tương tác là tương tác Coulomb, tương tác cộng hóa trị và tương tác van der Waals trong hai vật liệu perovskite đó. Các đại lượng nhiệt động được tính số ở áp suất $P = 0$ GPa từ nhiệt độ phòng $\rightarrow 1998$ K cho SrTiO_3 và từ nhiệt độ 400 K $\rightarrow 1500$ K cho BaTiO_3 . Kết quả tính toán tham số mạng của BaTiO_3 và các đại lượng nhiệt động như hằng số mạng, hệ số dẫn nở nhiệt, nhiệt dung đẳng áp của SrTiO_3 phù hợp với thực nghiệm và tính toán lý thuyết khác.

+ Đã xây dựng được phương trình trạng thái cho phép xác định biểu thức giải tích của các đại lượng nhiệt động như độ dãn của nguyên tử khỏi vị trí cân bằng nút mạng, hằng số mạng, hệ số dẫn nở nhiệt, nhiệt dung đẳng tích, hệ số nén đẳng nhiệt, nhiệt dung đẳng áp của vật liệu cấu trúc perovskite pha tinh thể lập phương ở các áp suất khác nhau. Sử dụng thế năng tương tác cặp (2.64), luận án áp dụng tính số các đại lượng nhiệt động của SrTiO_3 trong vùng từ 0 GPa đến 9.4 GPa và cho BaTiO_3 từ 0 GPa đến 19 GPa. Kết quả tính toán tham số mạng cho SrTiO_3 và BaTiO_3 phù hợp với thực nghiệm và tính toán lý thuyết khác.

ĐỊNH HƯỚNG NGHIÊN CỨU TIẾP THEO

Trên cơ sở những kết quả đã đạt được của luận án, nghiên cứu sinh tiếp tục nghiên cứu theo định hướng của đề tài trong thời gian tới. Một số hướng nghiên cứu cụ thể như sau:

+ Phương pháp thống kê mô men và biểu thức thế năng tương tác cặp (2.64) có thể tiếp tục áp dụng nghiên cứu sự nóng chảy của vật liệu cấu trúc perovskite pha tinh thể lập phương.

+ Phương pháp thống kê mô men và biểu thức thế năng tương tác cặp (2.64) có thể tiếp tục áp dụng nghiên cứu các tính chất đàn hồi của vật liệu cấu trúc perovskite pha tinh thể lập phương.

DANH MỤC CÔNG TRÌNH KHOA HỌC CỦA TÁC GIẢ LIÊN QUAN ĐẾN LUẬN ÁN

1. **Cao Huy Phuong** and Vu Van Hung (2022), Study of the thermodynamic properties of SrTiO₃ perovskite by the statistical moment method with improved interatomic potential, Materials Today Communications, Volume 31, pp. 103439 (1–7), doi: <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2022.103439> . (WoS (IF = 3.662) và Scopus (Q2)).

2. **Cao Huy Phuong** and Vu Van Hung (2022), Study of the thermodynamic properties of SrTiO₃ perovskite under pressure by the statistical moment method with the improved interatomic potential, Computational Condensed Matter, Volume 31, pp. e00683 (1-9), doi: <https://doi.org/10.1016/j.cocom.2022.e00683> . (WoS và Scopus (Q3)).

3. **Cao Huy Phuong** and Vu Van Hung (2022), Influence of Temperature and Pressure on the Lattice Constant of SrTiO₃ Perovskite by the Statistical Moment Method with Improved Interatomic Potential, VNU Journal of Science: Mathematics – Physics, Volume 38, No. 3, pp. 38-48, doi: <https://doi.org/10.25073/2588-1124/vnumap.4706> .

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Adams D.J. and Oganov A.R. (2006), “Ab initio molecular dynamics study of CaSiO_3 perovskite at P-T conditions of Earth’s lower mantle”, *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.* 73(18), pp. 1–8.
2. Aditya J., Wang Y.G., Shi L.N. (2022), “Recent developments in BaTiO_3 based lead-free materials for energy storage applications”, *J. Alloys Compd.* 928, pp. 167066(1-33).
3. Ahn K., Wu X., Liu K., and Chien C. (1996), “Magnetic properties and colossal magnetoresistance of $\text{La}(\text{Ca})\text{MnO}_3$ materials doped with Fe”, *Phys. Rev. B.* 54(21), pp. 15299–15302.
4. Andreja Ž., Antonia R., and Jelena M. (2022), “Perovskite oxides as active materials in novel alternatives to well-known technologies: A review”, *Ceram. Int.* 48(19), pp. 27240–27261.
5. Attfield J.P. (2002), “‘A’ cation control of perovskite properties”, *Cryst. Eng.* 5(3–4), pp. 427–438.
6. Azhar F., Mahesh K. G., Mojtaba A.J., Sang H.C., Abd. R.M.Y., Daniel N.C., Wolfgang T., Felix D.M.V. and Henk J.B. (2022), “Perovskite light-emitting diodes”, *Nat. Electron.* 5, pp. 203–216.
7. Blanco M.A., Francisco E., and Luaña V. (2004), “GIBBS: Isothermal-isobaric thermodynamics of solids from energy curves using a quasi-harmonic Debye model”, *Comput. Phys. Commun.* 158(1), pp. 57–72.
8. Blasse G. (1965), “New compounds with perovskite-like structures”, *J. Inorg. Nucl. Chem.* 27(5), pp. 993–1003.
9. Borisevich A.Y., and Davies P.K. (2003), “ $\text{La}(\text{Li}_{1/3}\text{Ti}_{2/3})\text{O}_3$: A new 1:2

- ordered perovskite”, *J. Solid State Chem.* 170(1), pp. 198–201.
10. Boudali A., Khodja M.D., Amrani B., Bourbie D., Amara K., and Abada A. (2009), “First-principles study of structural, elastic, electronic, and thermal properties of SrTiO₃ perovskite cubic”, *Phys. Lett. A.* 373(8–9), pp. 879–884.
 11. Bunting E.N., Shelton G.R., and Creamer A.S. (1947), “Properties of Barium-Strontium Titanate Dielectrics”, *J. Am. Ceram. Soc.* 30(4), pp. 114–125.
 12. Burschka J., Pellet N., Moon S.J., Humphry B.R., Gao P., Nazeeruddin M.K., and Grätzel M. (2013), “Sequential deposition as a route to high-performance perovskite-sensitized solar cells”, *Nature* 499, pp. 316–319.
 13. Cao L., Sozontov E., and Zecenhagen J. (2000), “Cubic to tetragonal phase transition of SrTiO₃ under epitaxial stress: an X-ray backscattering study”, *Phys. Status Solidi Appl. Res.* 181(2), pp. 387–404.
 14. Choithrani R. and Gaur N.K. (2012), “Thermodynamics of calcium doped perovskite materials”, *AIP Conf. Proc.* 1447(1), pp. 1159–1160.
 15. Choithrani R., Gaur N.K., and Singh R.K. (2009), “Study of calcium doping effect on thermophysical properties of some perovskite manganites”, *J. Alloys Compd.* 480(2), pp. 727–731.
 16. Chung A., Deen J., Lee J.S., and Meyyappan M. (2010), “Topical review nanoscale memory devices”, *Nanotechnology* 21(41), pp. 412001(1-22).
 17. Cumming D.J., Kilner J.A., and Skinner S. (2011), “Structural properties of Ce-doped strontium titanate for fuel cell applications”, *J. Mater. Chem.* 21(13), pp. 5021–5026.

18. D. Wolf, P. Keblinski, S. R. Phillpot and J. Eggebrecht (1999), “Exact method for the simulation of Coulombic systems by spherically truncated, pairwise r^{-1} summation”, *J. Chem. Phys.* 110(17), pp. 8254–8282.
19. Le D.V., Dao A.Q., Vo T.T., Nguyen H.C., and Nguyen N.T. (2020), “Synthesis of textured $\text{Bi}_{0.5}(\text{Na}_{0.8}\text{K}_{0.2})_{0.5}\text{TiO}_3\text{--Ba}_{0.844}\text{Ca}_{0.156}(\text{Zr}_{0.096}\text{Ti}_{0.904})\text{O}_3$ lead-free ceramics for improving their electrical and energy storage properties”, *J. Mater. Sci. Mater. Electron.* 31, pp. 18056–18069.
20. Dar S.A., Srivastava V., and Sakalle U.K. (2017), “A First-Principles Calculation on Structural, Electronic, Magnetic, Mechanical, and Thermodynamic Properties of SrAmO_3 ”, *J. Supercond. Nov. Magn.* 30(11), pp. 3055–3063.
21. Davies P.K., Wu H., Borisevich A.Y., Molodetsky I.E., and Farber L. (2008), “Crystal chemistry of complex perovskites: New cation-ordered dielectric oxides”, *Annu. Rev. Mater. Res.* 38, pp. 369–401.
22. Demontis P., Spanu S., and Suffritti G.B. (2001), “Application of the Wolf method for the evaluation of Coulombic interactions to complex condensed matter systems: Aluminosilicates and water”, *J. Chem. Phys.* 114(18), pp. 7980–7988.
23. Dominique d.L. and Pascal R. (1996), “High-temperature heat capacity and thermal expansion SrTiO_3 and SrZrO_3 perovskites”, *Phys. Rev. B* 53(6), pp. 3013–3022.
24. Edwards L.R. and Lynch R.W. (1970), “The high pressure compressibility and Grüneisen parameter of strontium titanate”, *J. Phys. Chem. Solids* 31(3), pp. 573–574.

25. Evarestov R.A., Smirnov V.P., and Usvyat D.E. (2003), “Local properties of the electronic structure of cubic SrTiO₃, BaTiO₃ and PbTiO₃ crystals, analysed using Wannier-type atomic functions”, *Solid State Commun.* 127(6), pp. 423–426.
26. Ewald P.P. (1921), “Die Berechnung optischer und elektrostatischer Gitterpotentiale”, *Ann. Phys.* 369(3), pp. 253–287.
27. Furthmüller J. and Kresse G. (1996), “Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set”, *Phys. Rev. B* 54(16), pp. 11169–11186.
28. G. Shirane and Y. Yamada (1969), “Lattice-Dynamical Study of the 110°K Phase Transition in SrTiO₃”, *Phys. Rev.* 177(2), pp. 858–863.
29. Galasso F. and Pinto J. (1965), “Preparation of Ba(Na_{0.25}Ta_{0.75})O₃ and Sr(Na_{0.25}Ta_{0.76})O₃ with the Perovskite Structure”, *Inorg. Chem.* 4(2), pp. 255.
30. Gao F., Yuan Y., Wang K.F., Chen X.Y., Chen F., Liu J.M., and Ren Z.F. (2006), “Preparation and photoabsorption characterization BiFeO₃ nanowires”, *Appl. Phys. Lett.* 89(10), pp. 3–6.
31. Gao H., Cao J., Liu L., and Yang Y. (2011), “Theoretical investigation on the structure and electronic properties of barium titanate”, *J. Mol. Struct.* 1003(1–3), pp. 75–81.
32. Gerblinger J. and Meixner H. (1991), “Fast oxygen sensors based on sputtered strontium titanate”, *Sensors Actuators B. Chem.* 4(1–2), pp. 99–102.
33. Giannozzi P., Baroni S., Bonini N., Calandra M., Car R., Cavazzoni C.,

- Ceresoli D., Chiarotti G.L., Cococcioni M., Dabo I., et al. (2009), “QUANTUM ESPRESSO: A modular and open-source software project for quantum simulations of materials”, *J. Phys. Condens. Matter* 21(39), pp. 395502 (1-19).
34. Glazer A.M. (1972), “The classification of tilted octahedra in perovskites”, *Acta Crystallogr. B.* 28(11), pp. 3384–3392.
 35. Goh W.F., Yoon T.L., and Khan S.A. (2012), “Molecular dynamics simulation of thermodynamic and thermal transport properties of strontium titanate with improved potential parameters”, *Comput. Mater. Sci.* 60, pp. 123–129.
 36. Goldschmidt V.M. (1926), “Die Gesetze der Krystallochemie”, *Naturwissenschaften* 14, pp. 477–485.
 37. Guennou M., Bouvier P., Kreisel J., and MacHon D. (2010), “Pressure-temperature phase diagram of SrTiO₃ up to 53 GPa”, *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.* 81(5), pp. 1–10.
 38. H. Y. Hwang, S-W. Cheong, N. P. Ong and B. Batlogg (1996), “Spin-Polarized Intergrain Tunneling in La_{2/3}Sr_{1/3}MnO₃”, *Phys. Rev. Lett.* 77(10), pp. 2041–2044.
 39. Ha T.T., Phuong D.D., Hanh P.T.M., and Hieu H.K. (2020), “Investigation of mean-square displacement and elastic moduli of solid argon up to 85 GPa”, *Chem. Phys.* 539(June), pp. 110928 (1-6).
 40. Hachemi A., Hachemi H., Ferhat-Hamida A., and Louail L. (2010), “Elasticity of SrTiO₃ perovskite under high pressure in cubic, tetragonal and orthorhombic phases”, *Phys. Scr.* 82(2), pp. 025602(1-8).

41. Hang L., Junjie Z., Ligu T., Minghao L., Chaofan J., Siyang W., Xing Z., Yue L., Yu.Z., Yian Y, Wolfgang T., and Chenyi Y. (2022), “Sequential vacuum-evaporated perovskite solar cells with more than 24% efficiency”, *Sci. Adv.* 8(28), pp. eabo7422(1-8).
42. Haotong W., Dylan D., Wei W., Yehao D., Dengyang G., Tom J.S., Lei C., and Jinsong H. (2017), “Dopant compensation in alloyed perovskite single crystals for gamma-ray”, *Nat. Mater.* 16, pp. 826–833.
43. Hikichi Y., Chen Z., Newnham R.E., and Cross L.E. (1982), “Preparation, Thermal Change and Dielectrics Properties of Cubic Perovskites $A(B_{1/4}Nb_{3/4})O_3$ (A = Ba or Sr, B = Na or Li) ”, *Mater. Res. Bull.* 17(11), pp. 1371–1377.
44. Ho K.H., Hai H., Pham T.M.H., Tran T.H. (2022), “Revisiting the melting curves of vanadium and niobium metals under pressure”, *Vacuum* 206, pp. 11507(1-6).
45. Hung V.V., Lee J., and Masuda-Jindo K. (2006), “Investigation of thermodynamic properties of cerium dioxide by statistical moment method”, *J. Phys. Chem. Solids* 67(4), pp. 682–689.
46. Hung V.V. and Mai T.L.T. (2011), “Study of elastic properties of CeO_2 by statistical moment method”, *Phys. B* 406(21), pp. 4014–4018.
47. Hung V.V., Masuda-Jindo K., and Hanh P.T.M. (2006), “Application of the statistical moment method to thermodynamic quantities of silicon”, *J. Phys. Condens. Matter* 18(1), pp. 283–293.
48. Hung V.V., Phuong C.H., and Hoa N.T. (2014), “Study of thermodynamic properties of AuCu superlattice by the statistical moment method”, *J. Phys. Conf. Ser.* 537(1), pp. 012009(1-6).

49. Hung V.V., Thanh L.T.M., and Masuda-Jindo K. (2010), “Study of thermodynamic properties of cerium dioxide under high pressures”, *Comput. Mater. Sci.* 49(4 SUPPL.), pp. S355–S358.
50. Hung V.V., Thi L.T.M., and Hai N.T. (2006), “Investigation of Thermodynamic Quantities of the Cubic Zirconia By Statistical Moment”, *Adv. Nat. Sci.* 7(1&2), pp. 21–36.
51. Huy D.N., Cong T.B., and Yoshitada M. (2020), “Oxygen vacancy induced insulator-metal transition in LaNiO₃ thin films”, *Phys. Rev. B* 102(16), pp. 165411(1-8).
52. Hwang H.Y., Cheong S.W., Radaelli P.G., Marezio M., and Batlogg B. (1995), “Lattice effects on the magnetoresistance in doped LaMnO₃”, *Phys. Rev. Lett.* 75(5), pp. 914–917.
53. Íñiguez J. and Vanderbilt D. (2002), “First-Principles Study of the Temperature-Pressure Phase Diagram of BaTiO₃”, *Phys. Rev. Lett.* 89(11), pp. 9–12.
54. Ishidate T., Abe S., Takahashi H., and Mōri N. (1997), “Phase Diagram of BaTiO₃”, *Phys. Rev. Lett.* 78(12), pp. 2397–2400.
55. Itoh K. and Ochiai K. (1994), “Structural fluctuations of SrTiO₃ in the cubic phase”, *Ferroelectrics* 159, pp. 85–90.
56. Jacob K.T. and Rajitha G. (2011), “Thermodynamic properties of strontium titanates: Sr₂TiO₄, Sr₃Ti₂O₇, Sr₄Ti₃O₁₀, and SrTiO₃”, *J. Chem. Thermodyn.* 43(1), pp. 51–57.
57. James W.E., Rudolph S. and Herrich L.J. (1951), “Structure of Barium Titanate at Elevated Temperatures”, *J. Am. Chem. Soc.* 73(6), pp. 2934–

2935.

58. K. Momma and F. Izumi (2011), “VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data”, *J. Appl. Crystallogr.* 44, pp. 1272–1276.
59. Katsumata T., Inaguma Y., Itoh M., and Kawamura K. (1998), “Molecular dynamics simulation in SrTiO₃”, *Solid State Ionics* 108(1–4), pp. 175–178.
60. Kehr S.C., Liu Y.M., Martin L.W., Yu P., Gajek M., Yang S.Y., Yang C.H., Wenzel M.T., Jacob R., Von Ribbeck H.-G., et al. (2011), “Near-field examination of perovskite-based superlenses and superlens-enhanced probe-object coupling”, *Nat. Commun.* 2, pp. 249 (1-9).
61. Kohn W. and Hohenberg P. (1964), “Inhomogeneous Electron Gas”, *Phys. Rev.* 136(3B), pp. B864–B871.
62. Kohn W. (1999), “Nobel lecture: Electronic structure of matter - Wave functions and density functional”, *Rev. Mod. Phys.* 71(5), pp. 1253–1266.
63. Kojima A., Teshima K., Shirai Y., and Miyasaka T. (2009), “Organometal halide perovskites as visible-light sensitizers for photovoltaic cells”, *J. Am. Chem. Soc.* 131(17), pp. 6050–6051.
64. Kusters R.M., Singleton J., Keen D.A., McGreevy R., and Hayes W. (1989), “Magnetoresistance measurements on the magnetic semiconductor Nd_{0.5}Pb_{0.5}MnO₃”, *Phys. B* 155(1–3), pp. 362–365.
65. L.H. Nguyen, N.T. Dang, N.V. Dang, L.V. Bau, P.H. Nam, L.T.H. Phong, D.H. Manh, and P.T. Phong (2021), “Structural, magnetic, and electrical properties of Ti-doped La_{0.7}Ba_{0.3}Mn_{1-x}Ti_xO₃ (0 ≤ x ≤ 0.3) ceramics”, *J.*

- Alloy. Compd.* 859, pp. 157831(1-9).
66. L.Orr and J.P. Coughlin (1953), “High Temperature Heat Contents of Meta- and Orthotitanates of Barium and Strontium”, *J. Am. Chem. Soc.* 75(3), pp. 530–531.
 67. L.T.T. Ngan, N.T. Dang, N.X. Phuc, L.V. Bau, N.V. Dang, D.H. Manh, P.H. Nam, L.H. Nguyen, and P.T. Phong (2022), “Magnetic and transport behaviors of Co substitution in $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ perovskite”, *J. Alloys Compd.* 911, pp. 164967(1-9).
 68. Lam L.T. and Hung V.V. (2019), “Investigation of oxygen vacancy migration energy in yttrium doped cerium”, *J. Phys. Conf. Ser.* 1274(1), pp. 012004(1-8).
 69. Leapman R.D., Grunes L.A., and Fejes P.L. (1982), “Study of the L_{23} edges in the 3d transition metals and their oxides by electron-energy-loss spectroscopy with comparisons to theory”, *Phys. Rev. B* 26(2), pp. 614–635.
 70. Lee J.G. (2011), *Computational Materials Science: An introduction*, CRC Press Taylor & Francis Group, New York.
 71. Leibfried G. and Ludwig W. (1961), “Theory of Anharmonic Effects in Crystals”, *Solid State Phys.* 12, pp. 275–444.
 72. Lemanov V.V., Sotnikov A.V., Smirnova E.P., Weihnacht M., and Kunze R. (1999), “Perovskite CaTiO_3 as an incipient ferroelectric”, *Solid State Commun.* 110(11), pp. 611–614.
 73. Li X., Zhang W., and Du J. (2011), “Structural and thermodynamic properties of perovskite-type superconductor ZnNNi_3 by first-principles

- calculations”, *Mater. Trans.* 52(9), pp. 1717–1721.
74. Liang C., Feng L., Botao G., Chang Z., Jie W., Shiqing D., Hui L., He Q., and Jun C. (2023), “Excellent energy storage and mechanical performance in hetero-structure BaTiO₃-based relaxors”, *Chem. Eng. J.* 452, pp. 139222(1-9).
 75. Liu D. and Kelly T.L. (2014), “Perovskite solar cells with a planar heterojunction structure prepared using room-temperature solution processing techniques”, *Nat. Photonics* 8(2), pp. 133–138.
 76. Liu Q.Z., Wang H.F., Chen F., and Wu W. (2008), “Single-crystalline transparent and conductive oxide films with the perovskite structure: Sb-doped SrSnO₃”, *J. Appl. Phys.* 103, pp. 093709(1–5).
 77. Liu X.C., Hong R., and Tian C. (2009), “Tolerance factor and the stability discussion of ABO₃-type ilmenite”, *J. Mater. Sci. Mater. Electron.* 20(4), pp. 323–327.
 78. Lu Y., Jia D., Gao F., Hu T., and Chen Z. (2015), “First-principle calculations of the thermal properties of SrTiO₃ and SrO(SrTiO₃)_n (n=1,2)”, *Solid State Commun.* 201, pp. 25–30.
 79. Lytle F.W. (1964), “X-ray diffractometry of low-temperature phase transformations in strontium titanate”, *J. Appl. Phys.* 35(7), pp. 2212–2215.
 80. Maekawa T, Kurosaki K, and Yamanaka S (2006), “Thermal and mechanical properties of polycrystalline BaSnO₃”, *J. Alloys Compd.* 416(1–2), pp. 214–217.
 81. Malinowski M., Łukaszewicz K., and Åsbrink S. (1986), “The influence

- of high hydrostatic pressure on lattice parameters of a single crystal of BaTiO₃”, *J. Appl. Crystallogr.* 19(1), pp. 7–9.
82. Masuda-Jindo K., Hung V.V., and Tam P.D. (2003), “Thermodynamic quantities of metals investigated by an analytic statistical moment method”, *Phys. Rev. B* 67(9), pp. 32–40.
 83. Masuda-Jindo K., Hung V.V., and Tam P.D. (2002), “Application of statistical moment method to thermodynamic quantities of metals and alloys”, *Calphad* 26(1), pp. 15–32.
 84. Miyake S. and Ueda R. (1947), “On Phase Transformation of BaTiO₃”, *J. Phys. Soc. Japan* 2(5), pp. 93–97.
 85. Mohr P.J., Newell D.B., and Taylor B.N. (2016), “CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2014”, *Rev. Mod. Phys.* 88(3), pp. 1–73.
 86. Müller K.A. and Burkard H. (1979), “SrTiO₃: An intrinsic quantum paraelectric below 4K”, *Phys. Rev. B* 19(7), pp. 3593–3602.
 87. Müller O.B. und U (2002), “Symmetrieverwandtschaften bei Varianten des Perowskit-Typs”, *Acta Crystallogr. B* 58, pp. 594–606.
 88. Mumtaz M., Debidatta B., Suman C., Ramesh S., Muhammad W.I., Mukherjee S.K., Saleh S.A., and Huda A.A. (2022), “ First-principles calculations to investigate structural, dynamical, thermodynamic and thermoelectric properties of CdYF₃ perovskite”, *Comput. Theor. Chem.* 1217(3), pp. 113928(1-9).
 89. Nguyen H.L., Nguyen H.T., Dang D.D., Phung Q.B., Bach T.C., and Le T.H.T. (2019), “Alkali metal-substituted bismuth-based perovskite

- compounds: A DFT study”, *J. Sci. Adv. Mater. Devices* 4(3), pp. 492–498.
90. Nguyen Q.H., Vu M.H., Nguyen T.M.V. and Hua X.D. (2022), “Study on density and lattice compression of Al, Cu and AlCu in high temperature and pressure from statistical moment method”, *Mod. Phys. Lett. B* 36(34), pp. 2250183(1-13).
 91. Nguyen Q.H., Le H.V., and Hua X.D. (2022), “Equilibrium vacancy concentration and thermodynamic quantities of BCC defective alloys FeCrSi and VWSi under pressure”, *Mod. Phys. Lett. B* 36(22), pp. 2250105–2250301.
 92. Nguyen V.N., Ho K.H., and Duong D.P. (2022), “Equation-of-state and melting curve of solid neon and argon up to 100 GPa”, *Vacuum* 196, pp. 110725(1-6).
 93. Nuraje N. and Su K. (2013), “Perovskite ferroelectric nanomaterials”, *Nanoscale* 5(19), pp. 8752–8780.
 94. Pedone A., Malavasi G., Menziani M.C., Cormack A.N., and Segre U. (2006), “A new self-consistent empirical interatomic potential model for oxides, silicates, and silicas-based glasses”, *J. Phys. Chem. B* 110(24), pp. 11780–11795.
 95. Pham D.T. and Pham D.T. (2022), “P-V-T Equation of state of gold to high pressure and temperature, derived from statistical moment method”, *Vacuum* 198, pp. 110815(1-5).
 96. Piskunov S., Heifets E., Eglitis R.I., and Borstel G. (2004), “Bulk properties and electronic structure of SrTiO₃, BaTiO₃, PbTiO₃ perovskites: An ab initio HF/DFT study”, *Comput. Mater. Sci.* 29(2), pp.

165–178.

97. Piskunov S., Kotomin E.A., Heifets E., Maier J., Eglitis R.I., and Borstel G. (2005), “Hybrid DFT calculations of the atomic and electronic structure for ABO_3 perovskite (001) surfaces”, *Surf. Sci.* 575(1–2), pp. 75–88.
98. Poindexter E. and Giardini A.A. (1963), “Elastic constants of strontium titanate ($SrTiO_3$)”, *Phys. Rev.* 129(1), pp. 90–94.
99. Pruzan P., Gourdain D., Chervin J.C., Canny B., Couzinet B., and Hanfland M. (2002), “Equation of state of $BaTiO_3$ and $KNbO_3$ at room temperature up to 30 GPa”, *Solid State Commun.* 123(1–2), pp. 21–26.
100. PZhuang W.W., Pan W., Ulrich B.D., Lee J.J., Stecker L., Burmaster A., Evans D.R., Hsu S.T., Tajiri M., Shimaoka A., et al. (2002), “Novell colossal magnetoresistive thin film nonvolatile resistance random access memory (RRAM)”, *Tech. Dig. - Int. Electron Devices Meeting.*, San Francisco, CA, USA, pp. 193–196.
101. Qiuling T., Pengcheng X., Minjie L., and Wencong L. (2021), “Machine learning for perovskite materials design and discovery”, *npj Comput. Mater.* 7(23), pp. 1–18.
102. Quoc T.P., Van K.V., An B.N., Huy S.N., and Nam N.H. (2012), “Magnetotransport properties and magnetocaloric effect in $La_{0.67}Ca_{0.33}Mn_{1-x}TM_xO_3$ (TM=Cu, Zn) perovskite manganites”, *J. Magn. Magn. Mater.* 324(15), pp. 2363–2367.
103. Ravel B., Stern E.A., Vedrinskii R.I., and Kraizman V. (1998), “Local structure and the phase transitions of $BaTiO_3$ ”, *Ferroelectrics* 206(1), pp. 407–430.

104. Rittirum M., Seetawan T., Yokhasing S., Matarat K., Bach T.P., Kumar M., and Han J.G. (2016), “La/Sm/Er Cation Doping Induced Thermal Properties of SrTiO₃ Perovskite”, *Inorg. Chem.* 55(17), pp. 8822–8826.
105. Rodriguez-Martinez L.M. and Attfield J.P. (1998), “Cation disorder and the metal-insulator transition temperature in manganese oxide perovskites”, *Phys. Rev. B* 58(5), pp. 2426–2429.
106. Rodríguez-Martínez L.M. and Attfield J.P. (2000), “Disorder-induced orbital ordering in L_{0.7}M_{0.3}MnO₃ perovskites”, *Phys. Rev. B* 63(2), pp. 1–7.
107. Ruyan A.S.B. and Rustum G. (2000), “The perovskite structure—a review of its role in ceramic science and technology”, *Mater. Res. Innov.* 4(1), pp. 3–26.
108. Saeed S.I.A., Tarek M. H., Iman S.E-M (2021), “A molecular dynamics study of the effect of Coulomb Buckingham Potential on equilibrium structural properties of calcium titanate perovskite”, *Curr. Appl. Phys.* 40, pp. 126–131.
109. Samara G.A. (1966), “Pressure and temperature dependences of the dielectric properties of the perovskites BaTiO₃ and SrTiO₃”, *Phys. Rev.* 151(2), pp. 378–386.
110. Schneider S.J. and Roth R.S. (1960), “Perovskite-Type Compounds in Binary Rare Earth Oxide Systems”, *J. Am. Ceram. Soc.* 43(2), pp. 115–115.
111. Seetawan T., Wong-Ud-Dee G., Thanachayanont C., and Amornkitbumrung V. (2010), “Molecular dynamics simulation of strontium titanate”, *Chinese Phys. Lett.* 27(2), pp. 3–5.

112. Suchomel M.R., Fogg A.M., Allix M., Niu H., Claridge J.B., and Rosseinsky M.J. (2006), “Erratum: Additions and corrections $\text{Bi}_2\text{ZnTiO}_6$: A lead-free closed-shell polar perovskite with an ionic polarization of $150 \mu\text{C}\cdot\text{cm}^{-2}$ ”, *Chem. Mater.* 18(21), pp. 4987–4989.
113. Sundaresan A., Maignan A., and Raveau B. (1997), “Effect of-site cation size mismatch on charge ordering and colossal magnetoresistance properties of perovskite manganites”, *Phys. Rev. B* 56(9), pp. 5092–5095.
114. Tae-Hee H., Kyung Y.J., Yitong D., Richard H.F., Edward H.S., and Tae-Woo L. (2022), “A roadmap for the commercialization of perovskite light emitters”, *Nat. Rev. Mater.* 7, pp. 757–777.
115. Tang N. and Hung V.V. (1988), “Investigation of the Thermodynamic Properties of Anharmonic Crystals by the Momentum Method. I. General Results for Face-Centred Cubic Crystals”, *Phys. Status Solidi* 149(2), pp. 511–519.
116. Teresa D.J.M., Ibarra M.R., García J., Blasco J., Ritter C., Algarabel P.A., and Marquina C. (1996), “Spin-glass insulator state in $(\text{Tb-La})_{2/3}\text{Ca}_{1/3}\text{MnO}_3$ perovskite”, *Phys. Rev. Lett.* 76(18), pp. 3392–3395.
117. Terletsky Y.P. and Tang N. (1967), “General Fluctuation Theorems of Quantum Statistics”, *Ann. Phys.* 474(5–6), pp. 299–311.
118. Tinte S., Íñiguez J., Rabe K.M., and Vanderbilt D. (2003), “Quantitative analysis of the first-principles effective Hamiltonian approach to ferroelectric perovskites”, *Phys. Rev. B.* 67(6), pp. 064106(1–8).
119. Touloukian Y.S., Kirby R.K., Taylor E.R., and Lee T.Y.R. (1977), *Thermophysical Properties of Matter - the TPRC Data Series. Volume 13. Thermal Expansion - Nonmetallic Solids*, IFI/Plenum, New York.

120. Tran D.T., Dinh C.L., Pham D.H.Y., Le V.B., Vu H.K., Zhihao W., Hong-Guang P., Nguyen M.A., Seong-Cho Y. (2018), “Magnetic and magnetocaloric properties in second-order phase transition $\text{La}_{1-x}\text{K}_x\text{MnO}_3$ and their composites”, *Phys. B Condens. Matter* 532, pp. 166–171.
121. Tran D.C., Nguyen Q.H., Nguyen D.T., Nguyen T.T. and Anh D.P. (2022), “Theoretical predictions of melting behaviors of hcp iron up to 4000 GPa”, *Phys. Rev. B* 106(9), pp. 094103(1-9).
122. Tsuchiya T. and Tsuchiya J. (2007), “High-pressure-high-temperature phase relations of MgGeO_3 : First-principles calculations”, *Phys. Rev. B* 76(9), pp. 2–5.
123. Urban J.J., Ouyang L., Jo M.H., Wang D.S., and Park H. (2004), “Synthesis of single-crystalline $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$ nanocubes with adjustable doping levels”, *Nano Lett.* 4(8), pp. 1547–1550.
124. Wang K.Y., Song W.H., Dai J.M., Ye S.L., Wang S.G., Fang J., Chen J.L., Gao B.J., Du J.J., and Sun Y.P. (2001), “Structural, magnetic, and transport properties in a Cu-doped $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ system”, *J. Appl. Phys.* 90(12), pp. 6263–6267.
125. Weaver H.E. (1959), “Dielectric properties of single crystals of SrTiO_3 at low temperatures”, *J. Phys. Chem. Solids* 11(3–4), pp. 274–277.
126. Wood E.A. (1951), “Polymorphism in potassium niobate, sodium niobate, and other ABO_3 compounds”, *Acta Crystallogr.* 4(4), pp. 353–362.
127. Wrighton M.S., Ellis A.B., Wolczanski P.T., Morse D.L., Abrahamson H.B., and Ginley D.S. (1976), “Strontium Titanate Photoelectrodes. Efficient Photoassisted Electrolysis of Water at Zero Applied Potential”,

- J. Am. Chem. Soc.* 98(10), pp. 2774–2779.
128. Xiangtian X., Taikang Y., Jiayun S., Xiangwei Q., Zhenwei R., Dan W., Shihao D., Xiao W.S., Wallace C.H.C. and Kai W. (2022), “Capacitance–voltage characteristics of perovskite light-emitting diodes: Modeling and implementing on the analysis of carrier behaviors”, *Appl. Phys. Lett.* 120(24), pp. 243501(1-6).
 129. Y. Jiang, E. Parsonnet, A. Qualls, W. Zhao, S. Susarla, D. Pesquera, A. Dasgupta, M. Acharya, H. Zhang, T. Gosavi, C.-C. Lin, D. E. Nikonov, H. Li, I. A. Young, R. Ramesh, and L.W. Martin (2022), “Enabling ultra-low-voltage switching in BaTiO₃”, *Nat. Mater.* 21, pp. 779–785.
 130. Yamanaka S., Kurosaki K., Maekawa T., Matsuda T., Kobayashi S., and Uno M. (2005), “Thermochemical and thermophysical properties of alkaline-earth perovskites”, *J. Nucl. Mater.* 344(1–3), pp. 61–66.
 131. Yisheng X., Yaoheng L., Qingqing H., Ruoling X., Dongchu Chen XX& HH (2023), “Review of doping SrTiO₃ for photocatalytic applications”, *Bull. Mater. Sci.* 46(6), pp. 1-14.
 132. ZAbakumov A.M., Van T.G., Scheglov A.A., Shpanchenko R.V., and Antipov E.V. (1996), “The crystal structure of Ba₈Ta₆NiO₂₄: Cation ordering in hexagonal perovskites”, *J. Solid State Chem.* 125(1), pp. 102–107.
 133. Zahn D., Schilling B., and Kast S.M. (2002), “Enhancement of the wolf damped Coulomb potential: Static, dynamic, and dielectric properties of liquid water from molecular simulation”, *J. Phys. Chem. B* 106(41), pp. 10725–10732.
 134. Zeyu Z., Qingde S., Yue L., Feng L., Xulin M., Su-Huai W., and &

- Manling S. (2022), “Hydrogenated Cs₂AgBiBr₆ for significantly improved efficiency of lead-free inorganic double perovskite solar cell”, *Nat. Commun.* 13, pp. 3397(1-12).
135. Zhang Z., Qian P., Yang X., Wu B., Cai H.L., Zhang F.M., and Wu X.S. (2022), “Manipulating the carrier concentration and phase transition via Nb content in SrTiO₃”, *Sci. Rep.* 12(1), pp. 1–7.
136. Zhang Z., Zheng W., Lin R., and Huang F. (2018), “High-sensitive and fast response to 255 nm deep-UV light of CH₃NH₃PbX₃ (X=Cl, Br, I) bulk crystals”, *R. Soc. Open Sci.* 5(9), pp. 180905(1-9).
137. Zhong W. and Vanderbilt D. (1995), “Competing structural instabilities in cubic perovskites”, *Phys. Rev. Lett.* 74(13), pp. 2587–2590.
138. Zhou J. and Huang J. (2018), “Photodetectors Based on Organic–Inorganic Hybrid Lead Halide Perovskites”, *Adv. Sci.* 5(1), pp. 1700256(1-24).

PHỤ LỤC

Chương trình tính số các tham số và đại lượng nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite SrTiO_3 ở áp suất P và nhiệt độ T lập trình trên phần mềm Maple.

Chương trình tính số các tham số và đại lượng nhiệt động của vật liệu cấu trúc perovskite BaTiO_3 ở áp suất P và nhiệt độ T lập trình trên phần mềm Maple được xây dựng từ chương trình tính số của SrTiO_3 với tham số tương ứng cho BaTiO_3 ở trong Bảng 2.2.

[> restart;

Parameters of pair potential of atomic interaction

[> $ke := 8.987551793 \cdot 10^9$: $qe := 1.602176634 \cdot 10^{-19}$: $Na := 6.02214076 \cdot 10^{23}$:

Effective charge qi:

[> $q1 := 1.87 \cdot qe$: $q2 := 2.36 \cdot qe$: $q3 := -1.41 \cdot qe$: $heso := ke$:

Constant cij:

[> $c11 := 0$: $c12 := 0$: $c13 := 3.0 \cdot qe \cdot 10^{-120}$: $c21 := 0$: $c22 := 0$: $c23 := 1.0$
 $\cdot qe \cdot 10^{-120}$:

[> $c31 := 3.0 \cdot qe \cdot 10^{-120}$: $c32 := 1.0 \cdot qe \cdot 10^{-120}$: $c33 := 22.0 \cdot qe \cdot 10^{-120}$:

#Constant Dij:

[> $D11 := 0$: $D12 := 0$: $D13 := 0.016561 \cdot qe$: $D21 := 0$: $D22 := 0$: $D23$
 $:= 0.021905 \cdot qe$: $D31 := 0.016561 \cdot qe$: $D32 := 0.021905 \cdot qe$: $D33$
 $:= 0.1510 \cdot qe$:

#Constant bij:

[> $\beta11 := 0$: $\beta12 := 0$: $\beta13 := 2.19150 \cdot 10^{10}$: $\beta21 := 0$: $\beta22 := 0$: $\beta23$
 $:= 2.085525 \cdot 10^{10}$: $\beta31 := 2.19150 \cdot 10^{10}$: $\beta32 := 2.085525 \cdot 10^{10}$: $\beta33$
 $:= 1.0811 \cdot 10^{10}$:

#Constant roij :

[> $ro11 := 0$: $ro12 := 0$: $ro13 := 3.328330 \cdot 10^{-10}$: $ro21 := 0$: $ro22 := 0$:
 $ro23 := 2.708943 \cdot 10^{-10}$:
 $ro31 := 3.328330 \cdot 10^{-10}$:
 $ro32 := 2.708943 \cdot 10^{-10}$: $ro33 := 3.618701 \cdot 10^{-10}$:

#Relationship

[> $rs31 := a$: $rs21 := a$: $rs11 := \sqrt{2} \cdot rs21$:

[> $rs12 := \sqrt{1.5} \cdot rs11$: $rs13 := \sqrt{2} \cdot rs11$: $rs14 := \sqrt{3} \cdot rs11$: $rs15 := 2$
 $\cdot rs11$: $rs16 := \sqrt{5} \cdot rs11$: $rs17 := \sqrt{5.5} \cdot rs11$: $rs18 := \sqrt{6} \cdot rs11$: $rs19$
 $:= \sqrt{7} \cdot rs11$:

[> $rs110 := \sqrt{8} \cdot rs11$: $rs111 := 3 \cdot rs11$: $rs112 := \sqrt{9.5} \cdot rs11$: $rs113 := \sqrt{10}$
 $\cdot rs11$: $rs114 := \sqrt{11} \cdot rs11$: $rs115 := \sqrt{12} \cdot rs11$: $rs116 := \sqrt{13}$
 $\cdot rs11$:

$$\begin{aligned}
&> rs22 := \sqrt{3} \cdot rs21 : rs23 := 2 \cdot rs21 : rs24 := \sqrt{5} \cdot rs21 : rs25 := \sqrt{8} \cdot rs21 : \\
&\quad rs26 := 3 \cdot rs21 : rs27 := \sqrt{11} \cdot rs21 : rs28 := \sqrt{12} \cdot rs21 : rs29 := \sqrt{13} \\
&\quad \cdot rs21 : \\
&> rs210 := 4 \cdot rs21 : rs211 := \sqrt{17} \cdot rs21 : rs212 := \sqrt{19} \cdot rs21 : rs213 := \sqrt{20} \\
&\quad \cdot rs21 : rs214 := \sqrt{21} \cdot rs21 : rs215 := \sqrt{24} \cdot rs21 : rs216 := 5 \cdot rs21 :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&> rs32 := \sqrt{2} \cdot rs31 : rs33 := 2 \cdot rs31 : rs34 := \sqrt{5} \cdot rs31 : rs35 := \sqrt{6} \cdot rs31 : \\
&\quad rs36 := \sqrt{8} \cdot rs31 : rs37 := 3 \cdot rs31 : rs38 := \sqrt{10} \cdot rs31 : rs39 := \sqrt{12} \\
&\quad \cdot rs31 : \\
&> rs310 := \sqrt{13} \cdot rs31 : rs311 := \sqrt{14} \cdot rs31 : rs312 := 4 \cdot rs31 : rs313 := \sqrt{17} \\
&\quad \cdot rs31 : rs314 := \sqrt{18} \cdot rs31 : rs315 := \sqrt{20} \cdot rs31 : rs316 := \sqrt{21} \\
&\quad \cdot rs31 : \\
&> rs317 := \sqrt{22} \cdot rs31 : rs318 := \sqrt{24} \cdot rs31 : rs319 := 5 \cdot rs31 :
\end{aligned}$$

#The potential between two ions:

$$\begin{aligned}
&> \alpha1 := 0.01 \cdot 10^{10} : \alpha2 := 0.01 \cdot 10^{10} : \alpha3 := 0.01 \cdot 10^{10} : Rc1 := rs116 : Rc2 \\
&\quad := rs216 : Rc3 := rs319 :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&> tam\phi112 := heso \cdot q1 \cdot q2 \cdot \left(\frac{\text{erfc}(\alpha1 \cdot r12)}{r12} - \frac{\text{erfc}(\alpha1 \cdot Rc1)}{Rc1} \right. \\
&\quad \left. + \left(\frac{\text{erfc}(\alpha1 \cdot Rc1)}{Rc1^2} + \frac{2 \cdot \alpha1}{(\text{Pi})^{\frac{1}{2}}} \cdot \frac{\text{erfc}(-\alpha1^2 \cdot Rc1^2)}{Rc1} \right) \cdot (r12 - Rc1) \right) \\
&\quad + \frac{c12}{r12^{12}} + D12 \cdot \left((1 - \exp(-\beta12 \cdot (r12 - ro12)))^2 - 1 \right) : \phi112 \\
&\quad := unapply(tam\phi112, r12) : \phi121 := unapply(tam\phi112, r12) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&> tamd1\phi112 := diff(\phi112(r12), r12) : d1\phi112 := unapply(tamd1\phi112, \\
&\quad r12) : tamd1\phi121 := diff(\phi121(r12), r12) : d1\phi121 \\
&\quad := unapply(tamd1\phi121, r12) : \\
&> tamd2\phi112 := diff(\phi112(r12), r12\$2) : d2\phi112 \\
&\quad := unapply(tamd2\phi112, r12) : tamd2\phi121 := diff(\phi121(r12), r12 \\
&\quad \$2) : d2\phi121 := unapply(tamd2\phi121, r12) :
\end{aligned}$$

> tamd3φ112 := diff(φ112(r12), r12\$3) : d3φ112
 := unapply(tamd3φ112, r12) : tamd3φ121 := diff(φ121(r12), r12
 \$3) : d3φ121 := unapply(tamd3φ121, r12) :
 > tamd4φ112 := diff(φ112(r12), r12\$4) : d4φ112
 := unapply(tamd4φ112, r12) : tamd4φ121 := diff(φ121(r12), r12
 \$4) : d4φ121 := unapply(tamd4φ121, r12) :

> tamφ111 := heso · q1 · q1 · $\left(\frac{\text{erfc}(\alpha l \cdot r11)}{r11} - \frac{\text{erfc}(\alpha l \cdot Rc1)}{Rc1} \right.$
 + $\left. \left(\frac{\text{erfc}(\alpha l \cdot Rc1)}{Rc1^2} + \frac{2 \cdot \alpha l}{(\text{Pi})^{\frac{1}{2}}} \cdot \frac{\text{erfc}(-\alpha l^2 \cdot Rc1^2)}{Rc1} \right) \cdot (r11 - Rc1) \right)$
 + $\frac{c11}{r11^{12}} + D11 \cdot ((1 - \exp(-\beta11 \cdot (r11 - ro11)))^2 - 1)$: φ111
 := unapply(tamφ111, r11) :

> tamd1φ111 := diff(φ111(r11), r11\$1) : d1φ111
 := unapply(tamd1φ111, r11) : tamd2φ111 := diff(φ111(r11), r11
 \$2) : d2φ111 := unapply(tamd2φ111, r11) :
 > tamd3φ111 := diff(φ111(r11), r11\$3) : d3φ111
 := unapply(tamd3φ111, r11) : tamd4φ111 := diff(φ111(r11), r11
 \$4) : d4φ111 := unapply(tamd4φ111, r11) :

> tamφ113 := heso · q3 · q1 · $\left(\frac{\text{erfc}(\alpha l \cdot r31)}{r31} - \frac{\text{erfc}(\alpha l \cdot Rc1)}{Rc1} \right.$
 + $\left. \left(\frac{\text{erfc}(\alpha l \cdot Rc1)}{Rc1^2} + \frac{2 \cdot \alpha l}{(\text{Pi})^{\frac{1}{2}}} \cdot \frac{\text{erfc}(-\alpha l^2 \cdot Rc1^2)}{Rc1} \right) \cdot (r31 - Rc1) \right)$
 + $\frac{c31}{r31^{12}} + D31 \cdot ((1 - \exp(-\beta31 \cdot (r31 - ro31)))^2 - 1)$: φ131
 := unapply(tamφ113, r31) : φ113 := unapply(tamφ113, r31) :

> tamd1φ113 := diff(φ113(r31), r31\$1) : d1φ113
 := unapply(tamd1φ113, r31) : tamd1φ131 := diff(φ131(r31), r31
 \$1) : d1φ131 := unapply(tamd1φ131, r31) :
 > tamd2φ113 := diff(φ113(r31), r31\$2) : d2φ113
 := unapply(tamd2φ113, r31) : tamd2φ131 := diff(φ131(r31), r31
 \$2) : d2φ131 := unapply(tamd2φ131, r31) :
 > tamd3φ113 := diff(φ113(r31), r31\$3) : d3φ113
 := unapply(tamd3φ113, r31) : tamd3φ131 := diff(φ131(r31), r31

$\$3) : d3\varphi131 := unapply(tamd3\varphi131, r31) :$
 $> tamd4\varphi113 := diff(\varphi113(r31), r31\$4) : d4\varphi113$
 $:= unapply(tamd4\varphi113, r31) : tamd4\varphi131 := diff(\varphi131(r31), r31$
 $\$4) : d4\varphi131 := unapply(tamd4\varphi131, r31) :$

$> tam\varphi223 := heso \cdot q2 \cdot q3 \cdot \left(\frac{\operatorname{erfc}(\alpha2 \cdot r23)}{r23} - \frac{\operatorname{erfc}(\alpha2 \cdot Rc2)}{Rc2} \right.$
 $\left. + \left(\frac{\operatorname{erfc}(\alpha2 \cdot Rc2)}{Rc2^2} + \frac{2 \cdot \alpha2}{(\text{Pi})^{\frac{1}{2}}} \cdot \frac{\operatorname{erfc}(-\alpha2^2 \cdot Rc2^2)}{Rc2} \right) \cdot (r23 - Rc2) \right)$
 $+ \frac{c23}{(r23)^{12}} + D23 \cdot \left((1 - \exp(-\beta23 \cdot (r23 - ro23)))^2 - 1 \right) : \varphi223$
 $:= unapply(tam\varphi223, r23) : \varphi232 := unapply(tam\varphi223, r23) :$

$> tamd1\varphi223 := diff(\varphi223(r23), r23\$1) : d1\varphi223$
 $:= unapply(tamd1\varphi223, r23) : tamd1\varphi232 := diff(\varphi232(r23), r23$
 $\$1) : d1\varphi232 := unapply(tamd1\varphi232, r23) :$
 $> tamd2\varphi223 := diff(\varphi223(r23), r23\$2) : d2\varphi223$
 $:= unapply(tamd2\varphi223, r23) : tamd2\varphi232 := diff(\varphi232(r23), r23$
 $\$2) : d2\varphi232 := unapply(tamd2\varphi232, r23) :$
 $> tamd3\varphi223 := diff(\varphi223(r23), r23\$3) : d3\varphi223$
 $:= unapply(tamd3\varphi223, r23) : tamd3\varphi232 := diff(\varphi232(r23), r23$
 $\$3) : d3\varphi232 := unapply(tamd3\varphi232, r23) :$
 $> tamd4\varphi223 := diff(\varphi223(r23), r23\$4) : d4\varphi223$
 $:= unapply(tamd4\varphi223, r23) : tamd4\varphi232 := diff(\varphi232(r23), r23$
 $\$4) : d4\varphi232 := unapply(tamd4\varphi232, r23) :$

$> tam\varphi222 := heso \cdot q2 \cdot q2 \cdot \left(\frac{\operatorname{erfc}(\alpha2 \cdot r22)}{r22} - \frac{\operatorname{erfc}(\alpha2 \cdot Rc2)}{Rc2} \right.$
 $\left. + \left(\frac{\operatorname{erfc}(\alpha2 \cdot Rc2)}{Rc2^2} + \frac{2 \cdot \alpha2}{(\text{Pi})^{\frac{1}{2}}} \cdot \frac{\operatorname{erfc}(-\alpha2^2 \cdot Rc2^2)}{Rc2} \right) \cdot (r22 - Rc2) \right)$
 $+ \frac{c22}{r22^{12}} + D12 \cdot \left((1 - \exp(-\beta22 \cdot (r22 - ro22)))^2 - 1 \right) : \varphi222$
 $:= unapply(tam\varphi222, r22) :$

$> tamd1\varphi222 := diff(\varphi222(r22), r22\$1) : d1\varphi222$
 $:= unapply(tamd1\varphi222, r22) : tamd2\varphi222 := diff(\varphi222(r22), r22$
 $\$2) : d2\varphi222 := unapply(tamd2\varphi222, r22) :$

> tamd3φ222 := diff(φ222(r22), r22\$3) : d3φ222
:= unapply(tamd3φ222, r22) : tamd4φ222 := diff(φ222(r22), r22
\$4) : d4φ222 := unapply(tamd4φ222, r22) :

> tamφ221 := heso · q1 · q2 · $\left(\frac{\operatorname{erfc}(\alpha_2 \cdot r_{12})}{r_{12}} - \frac{\operatorname{erfc}(\alpha_2 \cdot Rc_2)}{Rc_2} \right.$
 $\left. + \left(\frac{\operatorname{erfc}(\alpha_2 \cdot Rc_2)}{Rc_2^2} + \frac{2 \cdot \alpha_2}{(\text{Pi})^2} \cdot \frac{\operatorname{erfc}(-\alpha_2^2 \cdot Rc_2^2)}{Rc_2} \right) \cdot (r_{12} - Rc_2) \right)$
+ $\frac{c_{12}}{r_{12}^{12}} + D_{12} \cdot \left((1 - \exp(-\beta_{12} \cdot (r_{12} - r_{o12})))^2 - 1 \right) : \varphi_{221}$
:= unapply(tamφ221, r12) : φ212 := unapply(tamφ221, r12) :

> tamd1φ212 := diff(φ212(r12), r12\$1) :
d1φ212 := unapply(tamd1φ212, r12) :

> tamd1φ221 := diff(φ221(r12), r12\$1) :
d1φ221 := unapply(tamd1φ221, r12) :

> tamd2φ212 := diff(φ212(r12), r12\$2) :
d2φ212 := unapply(tamd2φ212, r12) :

> tamd2φ221 := diff(φ221(r12), r12\$2) :
d2φ221 := unapply(tamd2φ221, r12) :

> tamd3φ212 := diff(φ212(r12), r12\$3) :
d3φ212 := unapply(tamd3φ212, r12) :

> tamd3φ221 := diff(φ221(r12), r12\$3) :
d3φ221 := unapply(tamd3φ221, r12) :

> tamd4φ212 := diff(φ212(r12), r12\$4) :
d4φ212 := unapply(tamd4φ212, r12) :

> tamd4φ221 := diff(φ221(r12), r12\$4) :
d4φ221 := unapply(tamd4φ221, r12) :

> tamφ331 := heso · q3 · q1 · $\left(\frac{\operatorname{erfc}(\alpha_3 \cdot r_{31})}{r_{31}} - \frac{\operatorname{erfc}(\alpha_3 \cdot Rc_3)}{Rc_3} \right.$
 $\left. + \left(\frac{\operatorname{erfc}(\alpha_3 \cdot Rc_3)}{Rc_3^2} + \frac{2 \cdot \alpha_3}{(\text{Pi})^2} \cdot \frac{\operatorname{erfc}(-\alpha_3^2 \cdot Rc_3^2)}{Rc_3} \right) \cdot (r_{31} - Rc_3) \right)$
+ $\frac{c_{31}}{r_{31}^{12}} + D_{31} \cdot \left((1 - \exp(-\beta_{31} \cdot (r_{31} - r_{o31})))^2 - 1 \right) : \varphi_{331}$
:= unapply(tamφ331, r31) : φ313 := unapply(tamφ331, r31) :

> $tamd1\phi331 := \text{diff}(\phi331(r31), r31\$1) : d1\phi331$
 $:= \text{unapply}(tamd1\phi331, r31) : tamd1\phi313 := \text{diff}(\phi313(r31), r31$
 $\$1) : d1\phi313 := \text{unapply}(tamd1\phi313, r31) :$
 > $tamd2\phi331 := \text{diff}(\phi331(r31), r31\$2) : d2\phi331$
 $:= \text{unapply}(tamd2\phi331, r31) : tamd2\phi313 := \text{diff}(\phi313(r31), r31$
 $\$2) : d2\phi313 := \text{unapply}(tamd2\phi313, r31) :$
 > $tamd3\phi331 := \text{diff}(\phi331(r31), r31\$3) : d3\phi331$
 $:= \text{unapply}(tamd3\phi331, r31) : tamd3\phi313 := \text{diff}(\phi313(r31), r31$
 $\$3) : d3\phi313 := \text{unapply}(tamd3\phi313, r31) :$
 > $tamd4\phi331 := \text{diff}(\phi331(r31), r31\$4) : d4\phi331$
 $:= \text{unapply}(tamd4\phi331, r31) : tamd4\phi313 := \text{diff}(\phi313(r31), r31$
 $\$4) : d4\phi313 := \text{unapply}(tamd4\phi313, r31) :$

> $tam\phi333 := \text{heso} \cdot q3 \cdot q3 \cdot \left(\frac{\text{erfc}(\alpha3 \cdot r33)}{r33} - \frac{\text{erfc}(\alpha3 \cdot Rc3)}{Rc3} \right.$
 $\left. + \left(\frac{\text{erfc}(\alpha3 \cdot Rc3)}{Rc3^2} + \frac{2 \cdot \alpha3}{(\text{Pi})^{\frac{1}{2}}} \cdot \frac{\text{erfc}(-\alpha3^2 \cdot Rc3^2)}{Rc3} \right) \cdot (r33 - Rc3) \right)$
 $+ \frac{c33}{r33^{12}} + D33 \cdot ((1 - \exp(-\beta33 \cdot (r33 - ro33)))^2 - 1) : \phi333$
 $:= \text{unapply}(tam\phi333, r33) :$

> $tamd1\phi333 := \text{diff}(\phi333(r33), r33\$1) : d1\phi333$
 $:= \text{unapply}(tamd1\phi333, r33) : tamd2\phi333 := \text{diff}(\phi333(r33), r33$
 $\$2) : d2\phi333 := \text{unapply}(tamd2\phi333, r33) :$
 > $tamd3\phi333 := \text{diff}(\phi333(r33), r33\$3) : d3\phi333$
 $:= \text{unapply}(tamd3\phi333, r33) : tamd4\phi333 := \text{diff}(\phi333(r33), r33$
 $\$4) : d4\phi333 := \text{unapply}(tamd4\phi333, r33) :$

> $tam\phi323 := \text{heso} \cdot q2 \cdot q3 \cdot \left(\frac{\text{erfc}(\alpha3 \cdot r23)}{r23} - \frac{\text{erfc}(\alpha3 \cdot Rc3)}{Rc3} \right.$
 $\left. + \left(\frac{\text{erfc}(\alpha3 \cdot Rc3)}{Rc3^2} + \frac{2 \cdot \alpha3}{(\text{Pi})^{\frac{1}{2}}} \cdot \frac{\text{erfc}(-\alpha3^2 \cdot Rc3^2)}{Rc3} \right) \cdot (r23 - Rc3) \right)$
 $+ \frac{c23}{(r23)^{12}} + D23 \cdot ((1 - \exp(-\beta23 \cdot (r23 - ro23)))^2 - 1) : \phi323$
 $:= \text{unapply}(tam\phi323, r23) : \phi332 := \text{unapply}(tam\phi323, r23) :$

> $tamd1\phi323 := \text{diff}(\phi323(r23), r23\$1) : d1\phi323$
 $:= \text{unapply}(tamd1\phi323, r23) : tamd1\phi332 := \text{diff}(\phi332(r23), r23$

$\$1) : d1\phi332 := unapply(tamd1\phi332, r23) :$
 $> tamd2\phi323 := diff(\phi323(r23), r23\$2) : d2\phi323$
 $:= unapply(tamd2\phi323, r23) : tamd2\phi332 := diff(\phi332(r23), r23$
 $\$2) : d2\phi332 := unapply(tamd2\phi332, r23) :$
 $> tamd3\phi323 := diff(\phi323(r23), r23\$3) : d3\phi323$
 $:= unapply(tamd3\phi323, r23) : tamd3\phi332 := diff(\phi332(r23), r23$
 $\$3) : d3\phi332 := unapply(tamd3\phi332, r23) :$
 $> tamd4\phi323 := diff(\phi323(r23), r23\$4) : d4\phi323$
 $:= unapply(tamd4\phi323, r23) : tamd4\phi332 := diff(\phi332(r23), r23$
 $\$4) : d4\phi332 := unapply(tamd4\phi332, r23) :$

Potential ennergy

$> msr1 := 0 : lsr1 := 0 : psr1 := 12 : msr2 := 0 : lsr2 := 8 : psr2 := 0 :$
 $msr3 := 6 : lsr3 := 0 : psr3 := 0 : msr4 := 0 : lsr4 := 0 : psr4$
 $:= 24 : msr5 := 12 : lsr5 := 0 : psr5 := 0 : msr6 := 0 : lsr6 := 0 :$
 $psr6 := 24 : msr7 := 0 : lsr7 := 24 : psr7 := 0 : msr8 := 8 : lsr8$
 $:= 0 : psr8 := 0 : msr9 := 0 : lsr9 := 0 : psr9 := 48 : msr10 := 6 :$
 $lsr10 := 0 : psr10 := 0 : msr11 := 0 : lsr11 := 0 : psr11 := 36 :$
 $msr12 := 0 : lsr12 := 24 : psr12 := 0 : msr13 := 24 : lsr13 := 0 :$
 $psr13 := 0 : msr14 := 0 : lsr14 := 0 : psr14 := 24 : msr15 := 24 :$
 $lsr15 := 0 : psr15 := 0 : msr16 := 0 : lsr16 := 0 : psr16 := 72 :$

$> u0sr := \frac{1}{2} \cdot (msr1 \cdot \phi111(rs11) + lsr1 \cdot \phi112(rs11) + psr1 \cdot \phi113(rs11))$
 $+ \frac{1}{2} \cdot (msr2 \cdot \phi111(rs12) + lsr2 \cdot \phi112(rs12) + psr2 \cdot \phi113(rs12))$
 $+ \frac{1}{2} \cdot (msr3 \cdot \phi111(rs13) + lsr3 \cdot \phi112(rs13) + psr3 \cdot \phi113(rs13))$
 $+ \frac{1}{2} \cdot (msr4 \cdot \phi111(rs14) + lsr4 \cdot \phi112(rs14) + psr4 \cdot \phi113(rs14))$
 $+ \frac{1}{2} \cdot (msr5 \cdot \phi111(rs15) + lsr5 \cdot \phi112(rs15) + psr5 \cdot \phi113(rs15))$
 $+ \frac{1}{2} \cdot (msr6 \cdot \phi111(rs16) + lsr6 \cdot \phi112(rs16) + psr6 \cdot \phi113(rs16))$
 $+ \frac{1}{2} \cdot (msr7 \cdot \phi111(rs17) + lsr7 \cdot \phi112(rs17) + psr7 \cdot \phi113(rs17))$
 $+ \frac{1}{2} \cdot (msr8 \cdot \phi111(rs18) + lsr8 \cdot \phi112(rs18) + psr8 \cdot \phi113(rs18))$
 $+ \frac{1}{2} \cdot (msr9 \cdot \phi111(rs19) + lsr9 \cdot \phi112(rs19) + psr9 \cdot \phi113(rs19))$
 $+ \frac{1}{2} \cdot (msr10 \cdot \phi111(rs110) + lsr10 \cdot \phi112(rs110) + psr10$

$$\begin{aligned}
& \cdot \varphi_{113}(rs_{110})) + \frac{1}{2} \cdot (msr_{11} \cdot \varphi_{111}(rs_{111}) + lsr_{11} \cdot \varphi_{112}(rs_{111}) \\
& + psr_{11} \cdot \varphi_{113}(rs_{111})) + \frac{1}{2} \cdot (msr_{12} \cdot \varphi_{111}(rs_{112}) + lsr_{12} \\
& \cdot \varphi_{112}(rs_{112}) + psr_{12} \cdot \varphi_{113}(rs_{112})) + \frac{1}{2} \cdot (msr_{13} \cdot \varphi_{111}(rs_{113}) \\
& + lsr_{13} \cdot \varphi_{112}(rs_{113}) + psr_{13} \cdot \varphi_{113}(rs_{113})) + \frac{1}{2} \cdot (msr_{14} \\
& \cdot \varphi_{111}(rs_{114}) + lsr_{14} \cdot \varphi_{112}(rs_{114}) + psr_{14} \cdot \varphi_{113}(rs_{114})) + \frac{1}{2} \\
& \cdot (msr_{15} \cdot \varphi_{111}(rs_{115}) + lsr_{15} \cdot \varphi_{112}(rs_{115}) + psr_{15} \cdot \varphi_{113}(rs_{115})) \\
& + \frac{1}{2} \cdot (msr_{16} \cdot \varphi_{111}(rs_{116}) + lsr_{16} \cdot \varphi_{112}(rs_{116}) + psr_{16} \\
& \cdot \varphi_{113}(rs_{116})) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \text{mti1} & := 0 : \text{l ti1} := 0 : \text{pti1} := 6 : \text{mti2} := 8 : \text{l ti2} := 0 : \text{pti2} := 0 : \text{mti3} \\
& := 0 : \text{l ti3} := 6 : \text{pti3} := 0 : \text{mti4} := 0 : \text{l ti4} := 0 : \text{pti4} := 24 : \text{mti5} \\
& := 0 : \text{l ti5} := 12 : \text{pti5} := 0 : \text{mti6} := 0 : \text{l ti6} := 0 : \text{pti6} := 30 : \text{mti7} \\
& := 24 : \text{l ti7} := 0 : \text{pti7} := 0 : \text{mti8} := 0 : \text{l ti8} := 8 : \text{pti8} := 0 : \text{mti9} \\
& := 0 : \text{l ti9} := 0 : \text{pti9} := 24 : \text{mti10} := 0 : \text{l ti10} := 6 : \text{pti10} := 0 : \\
\text{mti11} & := 0 : \text{l ti11} := 0 : \text{pti11} := 48 : \text{mti12} := 24 : \text{l ti12} := 0 : \text{pti12} \\
& := 0 : \text{mti13} := 0 : \text{l ti13} := 24 : \text{pti13} := 0 : \text{mti14} := 0 : \text{l ti14} := 0 : \\
\text{pti14} & := 48 : \text{mti15} := 0 : \text{l ti15} := 24 : \text{pti15} := 0 : \text{mti16} := 0 : \text{l ti16} \\
& := 0 : \text{pti16} := 30 :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> u_{0ti} & := \frac{1}{2} \cdot (\text{mti1} \cdot \varphi_{221}(rs_{21}) + \text{l ti1} \cdot \varphi_{222}(rs_{21}) + \text{pti1} \cdot \varphi_{223}(rs_{21})) \\
& + \frac{1}{2} \cdot (\text{mti2} \cdot \varphi_{221}(rs_{22}) + \text{l ti2} \cdot \varphi_{222}(rs_{22}) + \text{pti2} \cdot \varphi_{223}(rs_{22})) \\
& + \frac{1}{2} \cdot (\text{mti3} \cdot \varphi_{221}(rs_{23}) + \text{l ti3} \cdot \varphi_{222}(rs_{23}) + \text{pti3} \cdot \varphi_{223}(rs_{23})) \\
& + \frac{1}{2} \cdot (\text{mti4} \cdot \varphi_{221}(rs_{24}) + \text{l ti4} \cdot \varphi_{222}(rs_{24}) + \text{pti4} \cdot \varphi_{223}(rs_{24})) \\
& + \frac{1}{2} \cdot (\text{mti5} \cdot \varphi_{221}(rs_{25}) + \text{l ti5} \cdot \varphi_{222}(rs_{25}) + \text{pti5} \cdot \varphi_{223}(rs_{25})) \\
& + \frac{1}{2} \cdot (\text{mti6} \cdot \varphi_{221}(rs_{26}) + \text{l ti6} \cdot \varphi_{222}(rs_{26}) + \text{pti6} \cdot \varphi_{223}(rs_{26})) \\
& + \frac{1}{2} \cdot (\text{mti7} \cdot \varphi_{221}(rs_{27}) + \text{l ti7} \cdot \varphi_{222}(rs_{27}) + \text{pti7} \cdot \varphi_{223}(rs_{27})) \\
& + \frac{1}{2} \cdot (\text{mti8} \cdot \varphi_{221}(rs_{28}) + \text{l ti8} \cdot \varphi_{222}(rs_{28}) + \text{pti8} \cdot \varphi_{223}(rs_{28})) \\
& + \frac{1}{2} \cdot (\text{mti9} \cdot \varphi_{221}(rs_{29}) + \text{l ti9} \cdot \varphi_{222}(rs_{29}) + \text{pti9} \cdot \varphi_{223}(rs_{29}))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} \cdot (mti10 \cdot \varphi221(rs210) + lti10 \cdot \varphi222(rs210) + pti10 \\
& \cdot \varphi223(rs210)) + \frac{1}{2} \cdot (mti11 \cdot \varphi221(rs211) + lti11 \cdot \varphi222(rs211) \\
& + pti11 \cdot \varphi223(rs211)) + \frac{1}{2} \cdot (mti12 \cdot \varphi221(rs212) + lti12 \\
& \cdot \varphi222(rs212) + pti12 \cdot \varphi223(rs212)) + \frac{1}{2} \cdot (mti13 \cdot \varphi221(rs213) \\
& + lti13 \cdot \varphi222(rs213) + pti13 \cdot \varphi223(rs213)) + \frac{1}{2} \cdot (mti14 \\
& \cdot \varphi221(rs214) + lti14 \cdot \varphi222(rs214) + pti14 \cdot \varphi223(rs214)) + \frac{1}{2} \\
& \cdot (mti15 \cdot \varphi221(rs215) + lti15 \cdot \varphi222(rs215) + pti15 \cdot \varphi223(rs215)) \\
& + \frac{1}{2} \cdot (mti16 \cdot \varphi221(rs216) + lti16 \cdot \varphi222(rs216) + pti16 \\
& \cdot \varphi223(rs216)) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \text{mo1} & := 0 : \text{lo1} := 2 : \text{po1} := 0 : \text{mo2} := 4 : \text{lo2} := 0 : \text{po2} := 8 : \text{mo3} \\
& := 0 : \text{lo3} := 0 : \text{po3} := 6 : \text{mo4} := 0 : \text{lo4} := 8 : \text{po4} := 0 : \text{mo5} \\
& := 8 : \text{lo5} := 0 : \text{po5} := 16 : \text{mo6} := 0 : \text{lo6} := 0 : \text{po6} := 12 : \text{mo7} \\
& := 0 : \text{lo7} := 10 : \text{po7} := 0 : \text{mo8} := 8 : \text{lo8} := 0 : \text{po8} := 16 : \text{mo9} \\
& := 0 : \text{lo9} := 0 : \text{po9} := 8 : \text{mo10} := 0 : \text{lo10} := 8 : \text{po10} := 0 : \\
\text{mo11} & := 16 : \text{lo11} := 0 : \text{po11} := 32 : \text{mo12} := 0 : \text{lo12} := 0 : \text{po12} \\
& := 6 : \text{mo13} := 0 : \text{lo13} := 16 : \text{po13} := 0 : \text{mo14} := 12 : \text{lo14} \\
& := 0 : \text{po14} := 24 : \text{mo15} := 0 : \text{lo15} := 0 : \text{po15} := 24 : \text{mo16} \\
& := 0 : \text{lo16} := 16 : \text{po16} := 0 : \text{mo17} := 8 : \text{lo17} := 0 : \text{po17} \\
& := 16 : \text{mo18} := 0 : \text{lo18} := 0 : \text{po18} := 24 : \text{mo19} := 0 : \text{lo19} \\
& := 10 : \text{po19} := 0 :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \text{u0o} & := \frac{1}{2} \cdot (\text{mo1} \cdot \varphi331(rs31) + \text{lo1} \cdot \varphi332(rs31) + \text{po1} \cdot \varphi333(rs31)) \\
& + \frac{1}{2} \cdot (\text{mo2} \cdot \varphi331(rs32) + \text{lo2} \cdot \varphi332(rs32) + \text{po2} \cdot \varphi333(rs32)) \\
& + \frac{1}{2} \cdot (\text{mo3} \cdot \varphi331(rs33) + \text{lo3} \cdot \varphi332(rs33) + \text{po3} \cdot \varphi333(rs33)) \\
& + \frac{1}{2} \cdot (\text{mo4} \cdot \varphi331(rs34) + \text{lo4} \cdot \varphi332(rs34) + \text{po4} \cdot \varphi333(rs34)) \\
& + \frac{1}{2} \cdot (\text{mo5} \cdot \varphi331(rs35) + \text{lo5} \cdot \varphi332(rs35) + \text{po5} \cdot \varphi333(rs35)) \\
& + \frac{1}{2} \cdot (\text{mo6} \cdot \varphi331(rs36) + \text{lo6} \cdot \varphi332(rs36) + \text{po6} \cdot \varphi333(rs36)) \\
& + \frac{1}{2} \cdot (\text{mo7} \cdot \varphi331(rs37) + \text{lo7} \cdot \varphi332(rs37) + \text{po7} \cdot \varphi333(rs37))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} \cdot (\text{mo}8 \cdot \varphi331(\text{rs}38) + \text{lo}8 \cdot \varphi332(\text{rs}38) + \text{po}8 \cdot \varphi333(\text{rs}38)) \\
& + \frac{1}{2} \cdot (\text{mo}9 \cdot \varphi331(\text{rs}39) + \text{lo}9 \cdot \varphi332(\text{rs}39) + \text{po}9 \cdot \varphi333(\text{rs}39)) \\
& + \frac{1}{2} \cdot (\text{mo}10 \cdot \varphi331(\text{rs}310) + \text{lo}10 \cdot \varphi332(\text{rs}310) + \text{po}10 \\
& \cdot \varphi333(\text{rs}310)) + \frac{1}{2} \cdot (\text{mo}11 \cdot \varphi331(\text{rs}311) + \text{lo}11 \cdot \varphi332(\text{rs}311) \\
& + \text{po}11 \cdot \varphi333(\text{rs}311)) + \frac{1}{2} \cdot (\text{mo}12 \cdot \varphi331(\text{rs}312) + \text{lo}12 \\
& \cdot \varphi332(\text{rs}312) + \text{po}12 \cdot \varphi333(\text{rs}312)) + \frac{1}{2} \cdot (\text{mo}13 \cdot \varphi331(\text{rs}313) \\
& + \text{lo}13 \cdot \varphi332(\text{rs}313) + \text{po}13 \cdot \varphi333(\text{rs}313)) + \frac{1}{2} \cdot (\text{mo}14 \\
& \cdot \varphi331(\text{rs}314) + \text{lo}14 \cdot \varphi332(\text{rs}314) + \text{po}14 \cdot \varphi333(\text{rs}314)) + \frac{1}{2} \\
& \cdot (\text{mo}15 \cdot \varphi331(\text{rs}315) + \text{lo}15 \cdot \varphi332(\text{rs}315) + \text{po}15 \cdot \varphi333(\text{rs}315)) \\
& + \frac{1}{2} \cdot (\text{mo}16 \cdot \varphi331(\text{rs}316) + \text{lo}16 \cdot \varphi332(\text{rs}316) + \text{po}16 \\
& \cdot \varphi333(\text{rs}316)) + \frac{1}{2} \cdot (\text{mo}17 \cdot \varphi331(\text{rs}317) + \text{lo}17 \cdot \varphi332(\text{rs}317) \\
& + \text{po}17 \cdot \varphi333(\text{rs}317)) + \frac{1}{2} \cdot (\text{mo}18 \cdot \varphi331(\text{rs}318) + \text{lo}18 \\
& \cdot \varphi332(\text{rs}318) + \text{po}18 \cdot \varphi333(\text{rs}318)) + \frac{1}{2} \cdot (\text{mo}19 \cdot \varphi331(\text{rs}319) \\
& + \text{lo}19 \cdot \varphi332(\text{rs}319) + \text{po}19 \cdot \varphi333(\text{rs}319)) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \triangleright d1u0sr := \text{diff}(u0sr, a) : d1u0ti := \text{diff}(u0ti, a) : d1u0o := \text{diff}(u0o, a) : \\
& d2u0sr := \text{diff}(u0sr, a\$2) : d2u0ti := \text{diff}(u0ti, a\$2) : d2u0o := \text{diff}(u0o, a\$2) :
\end{aligned}$$

Concentration of atoms

$$\triangleright nsr := \frac{1}{5} : nti := \frac{1}{5} : no := \frac{3}{5} :$$

Parameter

$$\begin{aligned}
& \triangleright SA1srsr := 0 : SA1srti := 0 : SA1sro := 2 : SA2srsr := 0 : SA2srti := 2 : \\
& SA2sro := 0 : SA3srsr := 2 : SA3srti := 0 : SA3sro := 0 : SA4srsr \\
& := 0 : SA4srti := 0 : SA4sro := 12 : SA5srsr := 8 : SA5srti := 0 : \\
& SA5sro := 0 : SA6srsr := 0 : SA6srti := 0 : SA6sro := 20 : SA7srsr \\
& := 0 : SA7srti := 22 : SA7sro := 0 : SA8srsr := 8 : SA8srti := 0 :
\end{aligned}$$

$SA8sro := 0 : SA9srsr := 0 : SA9srti := 0 : SA9sro := 56 : SA10srsr$
 $:= 8 : SA10srti := 0 : SA10sro := 0 : SA11srsr := 0 : SA11srti := 0 :$
 $SA11sro := 54 : SA12srsr := 0 : SA12srti := 38 : SA12sro := 0 :$
 $SA13srsr := 40 : SA13srti := 0 : SA13sro := 0 : SA14srsr := 0 :$
 $SA14srti := 0 : SA14sro := 44 : SA15srsr := 48 : SA15srti := 0 :$
 $SA15sro := 0 : SA16srsr := 0 : SA16srti := 0 : SA16sro := 156 :$

$> SA1tistr := 0 : SA1titi := 0 : SA1tio := 0.5 : SA2tistr := 2 : SA2titi := 0 :$
 $SA2tio := 0 : SA3tistr := 0 : SA3titi := 2 : SA3tio := 0 : SA4tistr := 0 :$
 $SA4titi := 0 : SA4tio := 10 : SA5tistr := 0 : SA5titi := 8 : SA5tio := 0 :$
 $SA6tistr := 0 : SA6titi := 0 : SA6tio := 22.5 : SA7tistr := 22 : SA7titi$
 $:= 0 : SA7tio := 0 : SA8tistr := 0 : SA8titi := 8 : SA8tio := 0 : SA9tistr$
 $:= 0 : SA9titi := 0 : SA9tio := 26 : SA10tistr := 0 : SA10titi := 8 :$
 $SA10tio := 0 : SA11tistr := 0 : SA11titi := 0 : SA11tio := 68 : SA12tistr$
 $:= 38 : SA12titi := 0 : SA12tio := 0 : SA13tistr := 0 : SA13titi := 40 :$
 $SA13tio := 0 : SA14tistr := 0 : SA14titi := 0 : SA14tio := 84 : SA15tistr$
 $:= 0 : SA15titi := 48 : SA15tio := 0 : SA16tistr := 0 : SA16titi := 0 :$
 $SA16tio := 62.5 : SA17tistr := 72 : SA17titi := 0 : SA17tio := 0 :$
 $SA18tistr := 0 : SA18titi := 0 : SA18tio := 174 : SA19tistr := 0 : SA19titi$
 $:= 32 : SA19tio := 0 :$

$> SA1osr := 0 : SA1oti := 0 : SA1oo := 0 : SA2osr := 1 : SA2oti := 0 : SA2oo$
 $:= 1 : SA3osr := 0 : SA3oti := 0 : SA3oo := 2 : SA4osr := 0 : SA4oti$
 $:= 4 : SA4oo := 0 : SA5osr := 2 : SA5oti := 0 : SA5oo := 10 : SA6osr$
 $:= 0 : SA6oti := 0 : SA6oo := 8 : SA7osr := 0 : SA7oti := 8 : SA7oo$
 $:= 0 : SA8osr := 10 : SA8oti := 0 : SA8oo := 10 : SA9osr := 0 : SA9oti$
 $:= 0 : SA9oo := 8 : SA10osr := 0 : SA10oti := 0 : SA10oo := 4 :$
 $SA11osr := 20 : SA11oti := 0 : SA11oo := 36 : SA12osr := 0 : SA12oti$
 $:= 0 : SA12oo := 8 : SA13osr := 0 : SA13oti := 24 : SA13oo := 0 :$
 $SA14osr := 11 : SA14oti := 0 : SA14oo := 43 : SA15osr := 0 : SA15oti$
 $:= 0 : SA15oo := 40 : SA16osr := 0 : SA16oti := 40 : SA16oo := 0 :$
 $SA17osr := 18 : SA17oti := 0 : SA17oo := 26 : SA18osr := 0 : SA18oti$
 $:= 0 : SA18oo := 48 : SA19osr := 0 : SA19oti := 16 : SA19oo := 0 :$

Lattice constant

$> ac := \sqrt{2} \cdot rs11 :$

The parameter k

$> ksr1 := \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs11^2} \cdot d2\phi111(rs11) - \frac{1}{rs11^3} \cdot d1\phi111(rs11) \right) \cdot SA1srsr \right.$
 $\cdot ac^2 \left. + \frac{1}{2} \cdot \frac{msr1}{rs11} \cdot d1\phi111(rs11) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs11^2} \cdot d2\phi112(rs11) \right. \right. \right.$
 $\left. \left. - \frac{1}{rs11^3} \cdot d1\phi112(rs11) \right) \cdot SA1srti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{lsr1}{rs11} \cdot d1\phi112(rs11)$

$$+ \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs11^2} \cdot d2\varphi113(rs11) - \frac{1}{rs11^3} \cdot d1\varphi113(rs11) \right) \cdot SA1sro \cdot ac^2 \right) \\ + \frac{1}{2} \cdot \frac{psr1}{rs11} \cdot d1\varphi113(rs11) :$$

$$\begin{aligned} > ksr2 := \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs12^2} \cdot d2\varphi111(rs12) - \frac{1}{rs12^3} \cdot d1\varphi111(rs12) \right) \cdot SA2srsr \right. \\ &\quad \cdot ac^2 \left. \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{msr2}{rs12} \cdot d1\varphi111(rs12) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs12^2} \cdot d2\varphi112(rs12) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{1}{rs12^3} \cdot d1\varphi112(rs12) \right) \cdot SA2srti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{lsr2}{rs12} \cdot d1\varphi112(rs12) \\ &\quad + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs12^2} \cdot d2\varphi113(rs12) - \frac{1}{rs12^3} \cdot d1\varphi113(rs12) \right) \cdot SA2sro \cdot ac^2 \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} \cdot \frac{psr2}{rs12} \cdot d1\varphi113(rs12) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > ksr3 := \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs13^2} \cdot d2\varphi111(rs13) - \frac{1}{rs13^3} \cdot d1\varphi111(rs13) \right) \cdot SA3srsr \right. \\ &\quad \cdot ac^2 \left. \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{msr3}{rs13} \cdot d1\varphi111(rs13) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs13^2} \cdot d2\varphi112(rs13) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{1}{rs13^3} \cdot d1\varphi112(rs13) \right) \cdot SA3srti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{lsr3}{rs13} \cdot d1\varphi112(rs13) \\ &\quad + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs13^2} \cdot d2\varphi113(rs13) - \frac{1}{rs13^3} \cdot d1\varphi113(rs13) \right) \cdot SA3sro \cdot ac^2 \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} \cdot \frac{psr3}{rs13} \cdot d1\varphi113(rs13) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > ksr4 := \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs14^2} \cdot d2\varphi111(rs14) - \frac{1}{rs14^3} \cdot d1\varphi111(rs14) \right) \cdot SA4srsr \right. \\ &\quad \cdot ac^2 \left. \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{msr4}{rs14} \cdot d1\varphi111(rs14) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs14^2} \cdot d2\varphi112(rs14) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{1}{rs14^3} \cdot d1\varphi112(rs14) \right) \cdot SA4srti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{lsr4}{rs14} \cdot d1\varphi112(rs14) \\ &\quad + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs14^2} \cdot d2\varphi113(rs14) - \frac{1}{rs14^3} \cdot d1\varphi113(rs14) \right) \cdot SA4sro \cdot ac^2 \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} \cdot \frac{psr4}{rs14} \cdot d1\varphi113(rs14) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > ksr5 := \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs15^2} \cdot d2\varphi111(rs15) - \frac{1}{rs15^3} \cdot d1\varphi111(rs15) \right) \cdot SA5srsr \right. \\ &\quad \cdot ac^2 \left. \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{msr5}{rs15} \cdot d1\varphi111(rs15) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs15^2} \cdot d2\varphi112(rs15) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{1}{rs15^3} \cdot d1\varphi112(rs15) \right) \cdot SA5srti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{lsr5}{rs15} \cdot d1\varphi112(rs15) \\ &\quad + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs15^2} \cdot d2\varphi113(rs15) - \frac{1}{rs15^3} \cdot d1\varphi113(rs15) \right) \cdot SA5sro \cdot ac^2 \right) \end{aligned}$$

$$+ \frac{1}{2} \cdot \frac{psr5}{rs15} \cdot d1\varphi113(rs15) :$$

$$\begin{aligned} > ksr6 := \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs16^2} \cdot d2\varphi111(rs16) - \frac{1}{rs16^3} \cdot d1\varphi111(rs16) \right) \cdot SA6srsr \right. \\ & \cdot ac^2 \left. \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{msr6}{rs16} \cdot d1\varphi111(rs16) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs16^2} \cdot d2\varphi112(rs16) \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{1}{rs16^3} \cdot d1\varphi112(rs16) \right) \cdot SA6srti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{lsr6}{rs16} \cdot d1\varphi112(rs16) \\ & + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs16^2} \cdot d2\varphi113(rs16) - \frac{1}{rs16^3} \cdot d1\varphi113(rs16) \right) \cdot SA6sro \cdot ac^2 \right) \\ & + \frac{1}{2} \cdot \frac{psr6}{rs16} \cdot d1\varphi113(rs16) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > ksr7 := \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs17^2} \cdot d2\varphi111(rs17) - \frac{1}{rs17^3} \cdot d1\varphi111(rs17) \right) \cdot SA7srsr \right. \\ & \cdot ac^2 \left. \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{msr7}{rs17} \cdot d1\varphi111(rs17) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs17^2} \cdot d2\varphi112(rs17) \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{1}{rs17^3} \cdot d1\varphi112(rs17) \right) \cdot SA7srti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{lsr7}{rs17} \cdot d1\varphi112(rs17) \\ & + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs17^2} \cdot d2\varphi113(rs17) - \frac{1}{rs17^3} \cdot d1\varphi113(rs17) \right) \cdot SA7sro \cdot ac^2 \right) \\ & + \frac{1}{2} \cdot \frac{psr7}{rs17} \cdot d1\varphi113(rs17) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > ksr8 := \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs18^2} \cdot d2\varphi111(rs18) - \frac{1}{rs18^3} \cdot d1\varphi111(rs18) \right) \cdot SA8srsr \right. \\ & \cdot ac^2 \left. \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{msr8}{rs18} \cdot d1\varphi111(rs18) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs18^2} \cdot d2\varphi112(rs18) \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{1}{rs18^3} \cdot d1\varphi112(rs18) \right) \cdot SA8srti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{lsr8}{rs18} \cdot d1\varphi112(rs18) \\ & + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs18^2} \cdot d2\varphi113(rs18) - \frac{1}{rs18^3} \cdot d1\varphi113(rs18) \right) \cdot SA8sro \cdot ac^2 \right) \\ & + \frac{1}{2} \cdot \frac{psr8}{rs18} \cdot d1\varphi113(rs18) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > ksr9 := \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs19^2} \cdot d2\varphi111(rs19) - \frac{1}{rs19^3} \cdot d1\varphi111(rs19) \right) \cdot SA9srsr \right. \\ & \cdot ac^2 \left. \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{msr9}{rs19} \cdot d1\varphi111(rs19) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs19^2} \cdot d2\varphi112(rs19) \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{1}{rs19^3} \cdot d1\varphi112(rs19) \right) \cdot SA9srti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{lsr9}{rs19} \cdot d1\varphi112(rs19) \\ & + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs19^2} \cdot d2\varphi113(rs19) - \frac{1}{rs19^3} \cdot d1\varphi113(rs19) \right) \cdot SA9sro \cdot ac^2 \right) \\ & + \frac{1}{2} \cdot \frac{psr9}{rs19} \cdot d1\varphi113(rs19) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> ksr10 := & \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs110^2} \cdot d2\varphi111(rs110) - \frac{1}{rs110^3} \cdot d1\varphi111(rs110) \right) \right. \\
& \cdot SA10srsr \cdot ac^2 \left. \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{msr10}{rs110} \cdot d1\varphi111(rs110) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs110^2} \right. \right. \\
& \cdot d2\varphi112(rs110) - \frac{1}{rs110^3} \cdot d1\varphi112(rs110) \left. \right) \cdot SA10srti \cdot ac^2 \left. \right) + \frac{1}{2} \\
& \cdot \frac{lsr10}{rs110} \cdot d1\varphi112(rs110) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs110^2} \cdot d2\varphi113(rs110) - \frac{1}{rs110^3} \right. \right. \\
& \cdot d1\varphi113(rs110) \left. \right) \cdot SA10sro \cdot ac^2 \left. \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{psr10}{rs110} \cdot d1\varphi113(rs110) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> ksr11 := & \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs111^2} \cdot d2\varphi111(rs111) - \frac{1}{rs111^3} \cdot d1\varphi111(rs111) \right) \right. \\
& \cdot SA11srsr \cdot ac^2 \left. \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{msr11}{rs111} \cdot d1\varphi111(rs111) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs111^2} \right. \right. \\
& \cdot d2\varphi112(rs111) - \frac{1}{rs111^3} \cdot d1\varphi112(rs111) \left. \right) \cdot SA11srti \cdot ac^2 \left. \right) + \frac{1}{2} \\
& \cdot \frac{lsr11}{rs111} \cdot d1\varphi112(rs111) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs111^2} \cdot d2\varphi113(rs111) - \frac{1}{rs111^3} \right. \right. \\
& \cdot d1\varphi113(rs111) \left. \right) \cdot SA11sro \cdot ac^2 \left. \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{psr11}{rs111} \cdot d1\varphi113(rs111) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> ksr12 := & \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs112^2} \cdot d2\varphi111(rs112) - \frac{1}{rs112^3} \cdot d1\varphi111(rs112) \right) \right. \\
& \cdot SA12srsr \cdot ac^2 \left. \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{msr12}{rs112} \cdot d1\varphi111(rs112) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs112^2} \right. \right. \\
& \cdot d2\varphi112(rs112) - \frac{1}{rs112^3} \cdot d1\varphi112(rs112) \left. \right) \cdot SA12srti \cdot ac^2 \left. \right) + \frac{1}{2} \\
& \cdot \frac{lsr12}{rs112} \cdot d1\varphi112(rs112) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs112^2} \cdot d2\varphi113(rs112) - \frac{1}{rs112^3} \right. \right. \\
& \cdot d1\varphi113(rs112) \left. \right) \cdot SA12sro \cdot ac^2 \left. \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{psr12}{rs112} \cdot d1\varphi113(rs112) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> ksr13 := & \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs113^2} \cdot d2\varphi111(rs113) - \frac{1}{rs113^3} \cdot d1\varphi111(rs113) \right) \right. \\
& \cdot SA13srsr \cdot ac^2 \left. \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{msr13}{rs113} \cdot d1\varphi111(rs113) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs113^2} \right. \right. \\
& \cdot d2\varphi112(rs113) - \frac{1}{rs113^3} \cdot d1\varphi112(rs113) \left. \right) \cdot SA13srti \cdot ac^2 \left. \right) + \frac{1}{2} \\
& \cdot \frac{lsr13}{rs113} \cdot d1\varphi112(rs113) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs113^2} \cdot d2\varphi113(rs113) - \frac{1}{rs113^3} \right. \right. \\
& \cdot d1\varphi113(rs113) \left. \right) \cdot SA13sro \cdot ac^2 \left. \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{psr13}{rs113} \cdot d1\varphi113(rs113) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> ksr14 := & \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs114^2} \cdot d2\varphi111(rs114) - \frac{1}{rs114^3} \cdot d1\varphi111(rs114) \right) \right. \\
& \cdot SA14srsr \cdot ac^2 \left. \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{msr14}{rs114} \cdot d1\varphi111(rs114) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs114^2} \right. \right. \\
& \cdot d2\varphi112(rs114) - \frac{1}{rs114^3} \cdot d1\varphi112(rs114) \left. \left. \right) \cdot SA14srti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\
& \cdot \frac{lsr14}{rs114} \cdot d1\varphi112(rs114) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs114^2} \cdot d2\varphi113(rs114) - \frac{1}{rs114^3} \right. \right. \\
& \cdot d1\varphi113(rs114) \left. \left. \right) \cdot SA14sro \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{psr14}{rs114} \cdot d1\varphi113(rs114) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> ksr15 := & \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs115^2} \cdot d2\varphi111(rs115) - \frac{1}{rs115^3} \cdot d1\varphi111(rs115) \right) \right. \\
& \cdot SA15srsr \cdot ac^2 \left. \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{msr15}{rs115} \cdot d1\varphi111(rs115) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs115^2} \right. \right. \\
& \cdot d2\varphi112(rs115) - \frac{1}{rs115^3} \cdot d1\varphi112(rs115) \left. \left. \right) \cdot SA15srti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\
& \cdot \frac{lsr15}{rs115} \cdot d1\varphi112(rs115) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs115^2} \cdot d2\varphi113(rs115) - \frac{1}{rs115^3} \right. \right. \\
& \cdot d1\varphi113(rs115) \left. \left. \right) \cdot SA15sro \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{psr15}{rs115} \cdot d1\varphi113(rs115) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> ksr16 := & \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs116^2} \cdot d2\varphi111(rs116) - \frac{1}{rs116^3} \cdot d1\varphi111(rs116) \right) \right. \\
& \cdot SA16srsr \cdot ac^2 \left. \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{msr16}{rs116} \cdot d1\varphi111(rs116) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs116^2} \right. \right. \\
& \cdot d2\varphi112(rs116) - \frac{1}{rs116^3} \cdot d1\varphi112(rs116) \left. \left. \right) \cdot SA16srti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\
& \cdot \frac{lsr16}{rs116} \cdot d1\varphi112(rs116) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs116^2} \cdot d2\varphi113(rs116) - \frac{1}{rs116^3} \right. \right. \\
& \cdot d1\varphi113(rs116) \left. \left. \right) \cdot SA16sro \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{psr16}{rs116} \cdot d1\varphi113(rs116) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> ksr := & ksr1 + ksr2 + ksr3 + ksr4 + ksr5 + ksr6 + ksr7 + ksr8 + ksr9 \\
& + ksr10 + ksr11 + ksr12 + ksr13 + ksr14 + ksr15 + ksr16 :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> kt11 := & \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs21^2} \cdot d2\varphi221(rs21) - \frac{1}{rs21^3} \cdot d1\varphi221(rs21) \right) \cdot SA1tisr \cdot ac^2 \right) \\
& + \frac{1}{2} \cdot \frac{mti1}{rs21} \cdot d1\varphi221(rs21) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs21^2} \cdot d2\varphi222(rs21) - \frac{1}{rs21^3} \right. \right. \\
& \cdot d1\varphi222(rs21) \left. \left. \right) \cdot SA1titi \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{lti1}{rs21} \cdot d1\varphi222(rs21) + \frac{1}{2} \\
& \cdot \left(\left(\frac{1}{rs21^2} \cdot d2\varphi223(rs21) - \frac{1}{rs21^3} \cdot d1\varphi223(rs21) \right) \cdot SA1tio \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2}
\end{aligned}$$

$$\cdot \frac{pti1}{rs21} \cdot d1\varphi223(rs21) :$$

$$\begin{aligned} > kti2 := & \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs22^2} \cdot d2\varphi221(rs22) - \frac{1}{rs22^3} \cdot d1\varphi221(rs22) \right) \cdot SA2tistr \cdot ac^2 \right) \\ & + \frac{1}{2} \cdot \frac{mti2}{rs22} \cdot d1\varphi221(rs22) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs22^2} \cdot d2\varphi222(rs22) - \frac{1}{rs22^3} \right. \right. \\ & \cdot d1\varphi222(rs22) \left. \left. \right) \cdot SA2titi \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{lti2}{rs22} \cdot d1\varphi222(rs22) + \frac{1}{2} \\ & \cdot \left(\left(\frac{1}{rs22^2} \cdot d2\varphi223(rs22) - \frac{1}{rs22^3} \cdot d1\varphi223(rs22) \right) \cdot SA2tio \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\ & \cdot \frac{pti2}{rs22} \cdot d1\varphi223(rs22) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > kti3 := & \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs23^2} \cdot d2\varphi221(rs23) - \frac{1}{rs23^3} \cdot d1\varphi221(rs23) \right) \cdot SA3tistr \cdot ac^2 \right) \\ & + \frac{1}{2} \cdot \frac{mti3}{rs23} \cdot d1\varphi221(rs23) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs23^2} \cdot d2\varphi222(rs23) - \frac{1}{rs23^3} \right. \right. \\ & \cdot d1\varphi222(rs23) \left. \left. \right) \cdot SA3titi \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{lti3}{rs23} \cdot d1\varphi222(rs23) + \frac{1}{2} \\ & \cdot \left(\left(\frac{1}{rs23^2} \cdot d2\varphi223(rs23) - \frac{1}{rs23^3} \cdot d1\varphi223(rs23) \right) \cdot SA3tio \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\ & \cdot \frac{pti3}{rs23} \cdot d1\varphi223(rs23) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > kti4 := & \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs24^2} \cdot d2\varphi221(rs24) - \frac{1}{rs24^3} \cdot d1\varphi221(rs24) \right) \cdot SA4tistr \cdot ac^2 \right) \\ & + \frac{1}{2} \cdot \frac{mti4}{rs24} \cdot d1\varphi221(rs24) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs24^2} \cdot d2\varphi222(rs24) - \frac{1}{rs24^3} \right. \right. \\ & \cdot d1\varphi222(rs24) \left. \left. \right) \cdot SA4titi \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{lti4}{rs24} \cdot d1\varphi222(rs24) + \frac{1}{2} \\ & \cdot \left(\left(\frac{1}{rs24^2} \cdot d2\varphi223(rs24) - \frac{1}{rs24^3} \cdot d1\varphi223(rs24) \right) \cdot SA4tio \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\ & \cdot \frac{pti4}{rs24} \cdot d1\varphi223(rs24) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > kti5 := & \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs25^2} \cdot d2\varphi221(rs25) - \frac{1}{rs25^3} \cdot d1\varphi221(rs25) \right) \cdot SA5tistr \cdot ac^2 \right) \\ & + \frac{1}{2} \cdot \frac{mti5}{rs25} \cdot d1\varphi221(rs25) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs25^2} \cdot d2\varphi222(rs25) - \frac{1}{rs25^3} \right. \right. \\ & \cdot d1\varphi222(rs25) \left. \left. \right) \cdot SA5titi \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{lti5}{rs25} \cdot d1\varphi222(rs25) + \frac{1}{2} \\ & \cdot \left(\left(\frac{1}{rs25^2} \cdot d2\varphi223(rs25) - \frac{1}{rs25^3} \cdot d1\varphi223(rs25) \right) \cdot SA5tio \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\ & \cdot \frac{pti5}{rs25} \cdot d1\varphi223(rs25) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \text{kti6} &:= \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs26^2} \cdot d2\varphi221(rs26) - \frac{1}{rs26^3} \cdot d1\varphi221(rs26) \right) \cdot SA6tistr \cdot ac^2 \right) \\
&+ \frac{1}{2} \cdot \frac{mti6}{rs26} \cdot d1\varphi221(rs26) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs26^2} \cdot d2\varphi222(rs26) - \frac{1}{rs26^3} \right. \right. \\
&\cdot d1\varphi222(rs26) \left. \left. \right) \cdot SA6titi \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{lti6}{rs26} \cdot d1\varphi222(rs26) + \frac{1}{2} \\
&\cdot \left(\left(\frac{1}{rs26^2} \cdot d2\varphi223(rs26) - \frac{1}{rs26^3} \cdot d1\varphi223(rs26) \right) \cdot SA6tio \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\
&\cdot \frac{pti6}{rs26} \cdot d1\varphi223(rs26) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \text{kti7} &:= \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs27^2} \cdot d2\varphi221(rs27) - \frac{1}{rs27^3} \cdot d1\varphi221(rs27) \right) \cdot SA7tistr \cdot ac^2 \right) \\
&+ \frac{1}{2} \cdot \frac{mti7}{rs27} \cdot d1\varphi221(rs27) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs27^2} \cdot d2\varphi222(rs27) - \frac{1}{rs27^3} \right. \right. \\
&\cdot d1\varphi222(rs27) \left. \left. \right) \cdot SA7titi \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{lti7}{rs27} \cdot d1\varphi222(rs27) + \frac{1}{2} \\
&\cdot \left(\left(\frac{1}{rs27^2} \cdot d2\varphi223(rs27) - \frac{1}{rs27^3} \cdot d1\varphi223(rs27) \right) \cdot SA7tio \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\
&\cdot \frac{pti7}{rs27} \cdot d1\varphi223(rs27) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \text{kti8} &:= \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs28^2} \cdot d2\varphi221(rs28) - \frac{1}{rs28^3} \cdot d1\varphi221(rs28) \right) \cdot SA8tistr \cdot ac^2 \right) \\
&+ \frac{1}{2} \cdot \frac{mti8}{rs28} \cdot d1\varphi221(rs28) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs28^2} \cdot d2\varphi222(rs28) - \frac{1}{rs28^3} \right. \right. \\
&\cdot d1\varphi222(rs28) \left. \left. \right) \cdot SA8titi \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{lti8}{rs28} \cdot d1\varphi222(rs28) + \frac{1}{2} \\
&\cdot \left(\left(\frac{1}{rs28^2} \cdot d2\varphi223(rs28) - \frac{1}{rs28^3} \cdot d1\varphi223(rs28) \right) \cdot SA8tio \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\
&\cdot \frac{pti8}{rs28} \cdot d1\varphi223(rs28) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \text{kti9} &:= \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs29^2} \cdot d2\varphi221(rs29) - \frac{1}{rs29^3} \cdot d1\varphi221(rs29) \right) \cdot SA9tistr \cdot ac^2 \right) \\
&+ \frac{1}{2} \cdot \frac{mti9}{rs29} \cdot d1\varphi221(rs29) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs29^2} \cdot d2\varphi222(rs29) - \frac{1}{rs29^3} \right. \right. \\
&\cdot d1\varphi222(rs29) \left. \left. \right) \cdot SA9titi \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{lti9}{rs29} \cdot d1\varphi222(rs29) + \frac{1}{2} \\
&\cdot \left(\left(\frac{1}{rs29^2} \cdot d2\varphi223(rs29) - \frac{1}{rs29^3} \cdot d1\varphi223(rs29) \right) \cdot SA9tio \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\
&\cdot \frac{pti9}{rs29} \cdot d1\varphi223(rs29) :
\end{aligned}$$

$$> \text{kti10} := \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs210^2} \cdot d2\varphi221(rs210) - \frac{1}{rs210^3} \cdot d1\varphi221(rs210) \right) \right)$$

$$\begin{aligned} & \cdot SA10tISR \cdot ac^2) + \frac{1}{2} \cdot \frac{mti10}{rs210} \cdot d1\varphi221(rs210) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs210^2} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d2\varphi222(rs210) - \frac{1}{rs210^3} \cdot d1\varphi222(rs210) \right) \cdot SA10tITI \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\ & \cdot \frac{lTI10}{rs210} \cdot d1\varphi222(rs210) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs210^2} \cdot d2\varphi223(rs210) - \frac{1}{rs210^3} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d1\varphi223(rs210) \right) \cdot SA10tIO \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{pti10}{rs210} \cdot d1\varphi223(rs210) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > kti11 := \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs211^2} \cdot d2\varphi221(rs211) - \frac{1}{rs211^3} \cdot d1\varphi221(rs211) \right) \right. \\ & \left. \cdot SA11tISR \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{mti11}{rs211} \cdot d1\varphi221(rs211) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs211^2} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d2\varphi222(rs211) - \frac{1}{rs211^3} \cdot d1\varphi222(rs211) \right) \cdot SA11tITI \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\ & \cdot \frac{lTI11}{rs211} \cdot d1\varphi222(rs211) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs211^2} \cdot d2\varphi223(rs211) - \frac{1}{rs211^3} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d1\varphi223(rs211) \right) \cdot SA11tIO \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{pti11}{rs211} \cdot d1\varphi223(rs211) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > kti12 := \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs212^2} \cdot d2\varphi221(rs212) - \frac{1}{rs212^3} \cdot d1\varphi221(rs212) \right) \right. \\ & \left. \cdot SA12tISR \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{mti12}{rs212} \cdot d1\varphi221(rs212) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs212^2} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d2\varphi222(rs212) - \frac{1}{rs212^3} \cdot d1\varphi222(rs212) \right) \cdot SA12tITI \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\ & \cdot \frac{lTI12}{rs212} \cdot d1\varphi222(rs212) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs212^2} \cdot d2\varphi223(rs212) - \frac{1}{rs212^3} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d1\varphi223(rs212) \right) \cdot SA12tIO \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{pti12}{rs212} \cdot d1\varphi223(rs212) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > kti13 := \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs213^2} \cdot d2\varphi221(rs213) - \frac{1}{rs213^3} \cdot d1\varphi221(rs213) \right) \right. \\ & \left. \cdot SA13tISR \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{mti13}{rs213} \cdot d1\varphi221(rs213) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs213^2} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d2\varphi222(rs213) - \frac{1}{rs213^3} \cdot d1\varphi222(rs213) \right) \cdot SA13tITI \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\ & \cdot \frac{lTI13}{rs213} \cdot d1\varphi222(rs213) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs213^2} \cdot d2\varphi223(rs213) - \frac{1}{rs213^3} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d1\varphi223(rs213) \right) \cdot SA13tIO \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{pti13}{rs213} \cdot d1\varphi223(rs213) : \end{aligned}$$

$$> kti14 := \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs214^2} \cdot d2\varphi221(rs214) - \frac{1}{rs214^3} \cdot d1\varphi221(rs214) \right) \right)$$

$$\begin{aligned} & \cdot SA14tistr \cdot ac^2) + \frac{1}{2} \cdot \frac{mti14}{rs214} \cdot d1\varphi221(rs214) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs214^2} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d2\varphi222(rs214) - \frac{1}{rs214^3} \cdot d1\varphi222(rs214) \right) \cdot SA14titi \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\ & \cdot \frac{lti14}{rs214} \cdot d1\varphi222(rs214) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs214^2} \cdot d2\varphi223(rs214) - \frac{1}{rs214^3} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d1\varphi223(rs214) \right) \cdot SA14tio \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{pti14}{rs214} \cdot d1\varphi223(rs214) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > kti15 := \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs215^2} \cdot d2\varphi221(rs215) - \frac{1}{rs215^3} \cdot d1\varphi221(rs215) \right) \right. \\ & \left. \cdot SA15tistr \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{mti15}{rs215} \cdot d1\varphi221(rs215) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs215^2} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d2\varphi222(rs215) - \frac{1}{rs215^3} \cdot d1\varphi222(rs215) \right) \cdot SA15titi \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\ & \cdot \frac{lti15}{rs215} \cdot d1\varphi222(rs215) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs215^2} \cdot d2\varphi223(rs215) - \frac{1}{rs215^3} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d1\varphi223(rs215) \right) \cdot SA15tio \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{pti15}{rs215} \cdot d1\varphi223(rs215) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > kti16 := \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs216^2} \cdot d2\varphi221(rs216) - \frac{1}{rs216^3} \cdot d1\varphi221(rs216) \right) \right. \\ & \left. \cdot SA16tistr \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{mti16}{rs216} \cdot d1\varphi221(rs216) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs216^2} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d2\varphi222(rs216) - \frac{1}{rs216^3} \cdot d1\varphi222(rs216) \right) \cdot SA16titi \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\ & \cdot \frac{lti16}{rs216} \cdot d1\varphi222(rs216) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs216^2} \cdot d2\varphi223(rs216) - \frac{1}{rs216^3} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d1\varphi223(rs216) \right) \cdot SA16tio \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{pti16}{rs216} \cdot d1\varphi223(rs216) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > kti := kti1 + kti2 + kti3 + kti4 + kti5 + kti6 + kti7 + kti8 + kti9 + kti10 \\ & + kti11 + kti12 + kti13 + kti14 + kti15 + kti16 : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > kol := \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs31^2} \cdot d2\varphi331(rs31) - \frac{1}{rs31^3} \cdot d1\varphi331(rs31) \right) \cdot SA1osr \cdot ac^2 \right) \\ & + \frac{1}{2} \cdot \frac{mol}{rs31} \cdot d1\varphi331(rs31) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs31^2} \cdot d2\varphi332(rs31) - \frac{1}{rs31^3} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d1\varphi332(rs31) \right) \cdot SA1oti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{lol}{rs31} \cdot d1\varphi332(rs31) + \frac{1}{2} \\ & \cdot \left(\left(\frac{1}{rs31^2} \cdot d2\varphi333(rs31) - \frac{1}{rs31^3} \cdot d1\varphi333(rs31) \right) \cdot SA1oo \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\ & \cdot \frac{pol}{rs31} \cdot d1\varphi333(rs31) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> ko2 := & \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs32^2} \cdot d2\varphi331(rs32) - \frac{1}{rs32^3} \cdot d1\varphi331(rs32) \right) \cdot SA2osr \cdot ac^2 \right) \\
& + \frac{1}{2} \cdot \frac{mo2}{rs32} \cdot d1\varphi331(rs32) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs32^2} \cdot d2\varphi332(rs32) - \frac{1}{rs32^3} \right. \right. \\
& \cdot d1\varphi332(rs32) \left. \left. \right) \cdot SA2oti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{lo2}{rs32} \cdot d1\varphi332(rs32) + \frac{1}{2} \\
& \cdot \left(\left(\frac{1}{rs32^2} \cdot d2\varphi333(rs32) - \frac{1}{rs32^3} \cdot d1\varphi333(rs32) \right) \cdot SA2oo \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\
& \cdot \frac{po2}{rs32} \cdot d1\varphi333(rs32) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> ko3 := & \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs33^2} \cdot d2\varphi331(rs33) - \frac{1}{rs33^3} \cdot d1\varphi331(rs33) \right) \cdot SA3osr \cdot ac^2 \right) \\
& + \frac{1}{2} \cdot \frac{mo3}{rs33} \cdot d1\varphi331(rs33) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs33^2} \cdot d2\varphi332(rs33) - \frac{1}{rs33^3} \right. \right. \\
& \cdot d1\varphi332(rs33) \left. \left. \right) \cdot SA3oti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{lo3}{rs33} \cdot d1\varphi332(rs33) + \frac{1}{2} \\
& \cdot \left(\left(\frac{1}{rs33^2} \cdot d2\varphi333(rs33) - \frac{1}{rs33^3} \cdot d1\varphi333(rs33) \right) \cdot SA3oo \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\
& \cdot \frac{po3}{rs33} \cdot d1\varphi333(rs33) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> ko4 := & \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs34^2} \cdot d2\varphi331(rs34) - \frac{1}{rs34^3} \cdot d1\varphi331(rs34) \right) \cdot SA4osr \cdot ac^2 \right) \\
& + \frac{1}{2} \cdot \frac{mo4}{rs34} \cdot d1\varphi331(rs34) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs34^2} \cdot d2\varphi332(rs34) - \frac{1}{rs34^3} \right. \right. \\
& \cdot d1\varphi332(rs34) \left. \left. \right) \cdot SA4oti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{lo4}{rs34} \cdot d1\varphi332(rs34) + \frac{1}{2} \\
& \cdot \left(\left(\frac{1}{rs34^2} \cdot d2\varphi333(rs34) - \frac{1}{rs34^3} \cdot d1\varphi333(rs34) \right) \cdot SA4oo \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\
& \cdot \frac{po4}{rs34} \cdot d1\varphi333(rs34) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> ko5 := & \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs35^2} \cdot d2\varphi331(rs35) - \frac{1}{rs35^3} \cdot d1\varphi331(rs35) \right) \cdot SA5osr \cdot ac^2 \right) \\
& + \frac{1}{2} \cdot \frac{mo5}{rs35} \cdot d1\varphi331(rs35) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs35^2} \cdot d2\varphi332(rs35) - \frac{1}{rs35^3} \right. \right. \\
& \cdot d1\varphi332(rs35) \left. \left. \right) \cdot SA5oti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{lo5}{rs35} \cdot d1\varphi332(rs35) + \frac{1}{2} \\
& \cdot \left(\left(\frac{1}{rs35^2} \cdot d2\varphi333(rs35) - \frac{1}{rs35^3} \cdot d1\varphi333(rs35) \right) \cdot SA5oo \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\
& \cdot \frac{po5}{rs35} \cdot d1\varphi333(rs35) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> ko6 := & \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs36^2} \cdot d2\varphi331(rs36) - \frac{1}{rs36^3} \cdot d1\varphi331(rs36) \right) \cdot SA6osr \cdot ac^2 \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} \cdot \frac{mo6}{rs36} \cdot d1\varphi331(rs36) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs36^2} \cdot d2\varphi332(rs36) - \frac{1}{rs36^3} \right. \right. \\
& \cdot d1\varphi332(rs36) \left. \left. \right) \cdot SA6oti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{lo6}{rs36} \cdot d1\varphi332(rs36) + \frac{1}{2} \\
& \cdot \left(\left(\frac{1}{rs36^2} \cdot d2\varphi333(rs36) - \frac{1}{rs36^3} \cdot d1\varphi333(rs36) \right) \cdot SA6oo \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\
& \cdot \frac{po6}{rs36} \cdot d1\varphi333(rs36) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> ko7 := & \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs37^2} \cdot d2\varphi331(rs37) - \frac{1}{rs37^3} \cdot d1\varphi331(rs37) \right) \cdot SA7osr \cdot ac^2 \right) \\
& + \frac{1}{2} \cdot \frac{mo7}{rs37} \cdot d1\varphi331(rs37) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs37^2} \cdot d2\varphi332(rs37) - \frac{1}{rs37^3} \right. \right. \\
& \cdot d1\varphi332(rs37) \left. \left. \right) \cdot SA7oti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{lo7}{rs37} \cdot d1\varphi332(rs37) + \frac{1}{2} \\
& \cdot \left(\left(\frac{1}{rs37^2} \cdot d2\varphi333(rs37) - \frac{1}{rs37^3} \cdot d1\varphi333(rs37) \right) \cdot SA7oo \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\
& \cdot \frac{po7}{rs37} \cdot d1\varphi333(rs37) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> ko8 := & \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs38^2} \cdot d2\varphi331(rs38) - \frac{1}{rs38^3} \cdot d1\varphi331(rs38) \right) \cdot SA8osr \cdot ac^2 \right) \\
& + \frac{1}{2} \cdot \frac{mo8}{rs38} \cdot d1\varphi331(rs38) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs38^2} \cdot d2\varphi332(rs38) - \frac{1}{rs38^3} \right. \right. \\
& \cdot d1\varphi332(rs38) \left. \left. \right) \cdot SA8oti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{lo8}{rs38} \cdot d1\varphi332(rs38) + \frac{1}{2} \\
& \cdot \left(\left(\frac{1}{rs38^2} \cdot d2\varphi333(rs38) - \frac{1}{rs38^3} \cdot d1\varphi333(rs38) \right) \cdot SA8oo \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\
& \cdot \frac{po8}{rs38} \cdot d1\varphi333(rs38) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> ko9 := & \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs39^2} \cdot d2\varphi331(rs39) - \frac{1}{rs39^3} \cdot d1\varphi331(rs39) \right) \cdot SA9osr \cdot ac^2 \right) \\
& + \frac{1}{2} \cdot \frac{mo9}{rs39} \cdot d1\varphi331(rs39) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs39^2} \cdot d2\varphi332(rs39) - \frac{1}{rs39^3} \right. \right. \\
& \cdot d1\varphi332(rs39) \left. \left. \right) \cdot SA9oti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{lo9}{rs39} \cdot d1\varphi332(rs39) + \frac{1}{2} \\
& \cdot \left(\left(\frac{1}{rs39^2} \cdot d2\varphi333(rs39) - \frac{1}{rs39^3} \cdot d1\varphi333(rs39) \right) \cdot SA9oo \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\
& \cdot \frac{po9}{rs39} \cdot d1\varphi333(rs39) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> ko10 := & \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs310^2} \cdot d2\varphi331(rs310) - \frac{1}{rs310^3} \cdot d1\varphi331(rs310) \right) \right. \\
& \left. \cdot SA10osr \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{mo10}{rs310} \cdot d1\varphi331(rs310) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs310^2} \right. \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \cdot d2\varphi332(rs310) - \frac{1}{rs310^3} \cdot d1\varphi332(rs310) \Big) \cdot SA10oti \cdot ac^2 \Big) + \frac{1}{2} \\ & \cdot \frac{lo10}{rs310} \cdot d1\varphi332(rs310) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs310^2} \cdot d2\varphi333(rs310) - \frac{1}{rs310^3} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d1\varphi333(rs310) \right) \cdot SA10oo \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{po10}{rs310} \cdot d1\varphi333(rs310) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > ko11 := \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs311^2} \cdot d2\varphi331(rs311) - \frac{1}{rs311^3} \cdot d1\varphi331(rs311) \right) \right. \\ & \left. \cdot SA11osr \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{mo11}{rs311} \cdot d1\varphi331(rs311) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs311^2} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d2\varphi332(rs311) - \frac{1}{rs311^3} \cdot d1\varphi332(rs311) \right) \cdot SA11oti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\ & \cdot \frac{lo11}{rs311} \cdot d1\varphi332(rs311) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs311^2} \cdot d2\varphi333(rs311) - \frac{1}{rs311^3} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d1\varphi333(rs311) \right) \cdot SA11oo \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{po11}{rs311} \cdot d1\varphi333(rs311) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > ko12 := \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs312^2} \cdot d2\varphi331(rs312) - \frac{1}{rs312^3} \cdot d1\varphi331(rs312) \right) \right. \\ & \left. \cdot SA12osr \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{mo12}{rs312} \cdot d1\varphi331(rs312) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs312^2} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d2\varphi332(rs312) - \frac{1}{rs312^3} \cdot d1\varphi332(rs312) \right) \cdot SA12oti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\ & \cdot \frac{lo12}{rs312} \cdot d1\varphi332(rs312) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs312^2} \cdot d2\varphi333(rs312) - \frac{1}{rs312^3} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d1\varphi333(rs312) \right) \cdot SA12oo \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{po12}{rs312} \cdot d1\varphi333(rs312) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > ko13 := \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs313^2} \cdot d2\varphi331(rs313) - \frac{1}{rs313^3} \cdot d1\varphi331(rs313) \right) \right. \\ & \left. \cdot SA13osr \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{mo13}{rs313} \cdot d1\varphi331(rs313) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs313^2} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d2\varphi332(rs313) - \frac{1}{rs313^3} \cdot d1\varphi332(rs313) \right) \cdot SA13oti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\ & \cdot \frac{lo13}{rs313} \cdot d1\varphi332(rs313) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs313^2} \cdot d2\varphi333(rs313) - \frac{1}{rs313^3} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d1\varphi333(rs313) \right) \cdot SA13oo \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{po13}{rs313} \cdot d1\varphi333(rs313) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > ko14 := \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs314^2} \cdot d2\varphi331(rs314) - \frac{1}{rs314^3} \cdot d1\varphi331(rs314) \right) \right. \\ & \left. \cdot SA14osr \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{mo14}{rs314} \cdot d1\varphi331(rs314) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs314^2} \right. \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \cdot d2\varphi332(rs314) - \frac{1}{rs314^3} \cdot d1\varphi332(rs314) \Big) \cdot SA14oti \cdot ac^2 \Big) + \frac{1}{2} \\ & \cdot \frac{lo14}{rs314} \cdot d1\varphi332(rs314) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs314^2} \cdot d2\varphi333(rs314) - \frac{1}{rs314^3} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d1\varphi333(rs314) \right) \cdot SA14oo \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{po14}{rs314} \cdot d1\varphi333(rs314) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > ko15 := \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs315^2} \cdot d2\varphi331(rs315) - \frac{1}{rs315^3} \cdot d1\varphi331(rs315) \right) \right. \\ & \left. \cdot SA15osr \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{mo15}{rs315} \cdot d1\varphi331(rs315) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs315^2} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d2\varphi332(rs315) - \frac{1}{rs315^3} \cdot d1\varphi332(rs315) \right) \cdot SA15oti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\ & \cdot \frac{lo15}{rs315} \cdot d1\varphi332(rs315) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs315^2} \cdot d2\varphi333(rs315) - \frac{1}{rs315^3} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d1\varphi333(rs315) \right) \cdot SA15oo \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{po15}{rs315} \cdot d1\varphi333(rs315) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > ko16 := \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs316^2} \cdot d2\varphi331(rs316) - \frac{1}{rs316^3} \cdot d1\varphi331(rs316) \right) \right. \\ & \left. \cdot SA16osr \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{mo16}{rs316} \cdot d1\varphi331(rs316) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs316^2} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d2\varphi332(rs316) - \frac{1}{rs316^3} \cdot d1\varphi332(rs316) \right) \cdot SA16oti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\ & \cdot \frac{lo16}{rs316} \cdot d1\varphi332(rs316) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs316^2} \cdot d2\varphi333(rs316) - \frac{1}{rs316^3} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d1\varphi333(rs316) \right) \cdot SA16oo \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{po16}{rs316} \cdot d1\varphi333(rs316) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > ko17 := \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs317^2} \cdot d2\varphi331(rs317) - \frac{1}{rs317^3} \cdot d1\varphi331(rs317) \right) \right. \\ & \left. \cdot SA17osr \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{mo17}{rs317} \cdot d1\varphi331(rs317) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs317^2} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d2\varphi332(rs317) - \frac{1}{rs317^3} \cdot d1\varphi332(rs317) \right) \cdot SA17oti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\ & \cdot \frac{lo17}{rs317} \cdot d1\varphi332(rs317) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs317^2} \cdot d2\varphi333(rs317) - \frac{1}{rs317^3} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d1\varphi333(rs317) \right) \cdot SA17oo \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{po17}{rs317} \cdot d1\varphi333(rs317) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > ko18 := \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs318^2} \cdot d2\varphi331(rs318) - \frac{1}{rs318^3} \cdot d1\varphi331(rs318) \right) \right. \\ & \left. \cdot SA18osr \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{mo18}{rs318} \cdot d1\varphi331(rs318) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs318^2} \right. \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \cdot d2\varphi332(rs318) - \frac{1}{rs318^3} \cdot d1\varphi332(rs318) \Big) \cdot SA18oti \cdot ac^2 \Big) + \frac{1}{2} \\ & \cdot \frac{lo18}{rs318} \cdot d1\varphi332(rs318) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs318^2} \cdot d2\varphi333(rs318) - \frac{1}{rs318^3} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d1\varphi333(rs318) \right) \cdot SA18oo \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{po18}{rs318} \cdot d1\varphi333(rs318) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > ko19 := \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs319^2} \cdot d2\varphi331(rs319) - \frac{1}{rs319^3} \cdot d1\varphi331(rs319) \right) \right. \\ & \left. \cdot SA19osr \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{mo19}{rs319} \cdot d1\varphi331(rs319) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs319^2} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d2\varphi332(rs319) - \frac{1}{rs319^3} \cdot d1\varphi332(rs319) \right) \cdot SA19oti \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \\ & \cdot \frac{lo19}{rs319} \cdot d1\varphi332(rs319) + \frac{1}{2} \cdot \left(\left(\frac{1}{rs319^2} \cdot d2\varphi333(rs319) - \frac{1}{rs319^3} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot d1\varphi333(rs319) \right) \cdot SA19oo \cdot ac^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{po19}{rs319} \cdot d1\varphi333(rs319) : \end{aligned}$$

$$> ko := ko1 + ko2 + ko3 + ko4 + ko5 + ko6 + ko7 + ko8 + ko9 + ko10 \\ + ko11 + ko12 + ko13 + ko14 + ko15 + ko16 + ko17 + ko18 + ko19 :$$

$$\begin{aligned} > d1ksr := diff(ksr, a) : d1kti := diff(kti, a) : d1ko := diff(ko, a) : d2ksr \\ & := diff(ksr, a\$2) : d2kti := diff(kti, a\$2) : d2ko := diff(ko, a\$2) : \end{aligned}$$

Physical constants

$$> h := 1.054571817 \cdot 10^{-34} : kb := 1.380649 \cdot 10^{-23} :$$

#Mass

$$\begin{aligned} > massr := 1.660539040 \cdot 10^{-27} \cdot 87.62 : masti := 1.660539040 \cdot 10^{-27} \cdot 47.867 : \\ & maso := 1.660539040 \cdot 10^{-27} \cdot 15.9994 : massto := nsr \cdot massr + nti \cdot masti \\ & + no \cdot maso : \end{aligned}$$

#Frequency

$$> \omega_{sr} := \sqrt{\frac{ksr}{massto}} : \omega_{ti} := \sqrt{\frac{kti}{massto}} : \omega_o := \sqrt{\frac{ko}{massto}} :$$

Equation of state for SrTiO3

$$\begin{aligned} > es := nsr \cdot \left(d1u0sr + \frac{3}{4} \cdot \frac{h \cdot \omega_{sr}}{ksr} \cdot d1ksr \right) + nti \cdot \left(d1u0ti + \frac{3}{4} \cdot \frac{h \cdot \omega_{ti}}{kti} \cdot d1kti \right) \\ & + no \cdot \left(d1u0o + \frac{3}{4} \cdot \frac{h \cdot \omega_o}{ko} \cdot d1ko \right) : fes := unapply(es, a) : \end{aligned}$$

$$r11 := \text{fsolve}\left(es + \frac{24}{5} \cdot a^2 \cdot (0.72 \cdot 10^9) = 0, a, a = 0..(2 \cdot 10^{-10})\right);$$

#The parameters

$$\begin{aligned} > SB1srsr := 0 : SB1srti := 0 : SB1sro := 0.5 : SB2srsr := 0 : SB2srti := 0.5 : \\ & SB2sro := 0 : SB3srsr := 2 : SB3srti := 0 : SB3sro := 0 : SB4srsr \\ & := 0 : SB4srti := 0 : SB4sro := 9 : SB5srsr := 8 : SB5srti := 0 : SB5sro \\ & := 0 : SB6srsr := 0 : SB6srti := 0 : SB6sro := 41 : SB7srsr := 0 : \\ & SB7srti := 41.5 : SB7sro := 0 : SB8srsr := 8 : SB8srti := 0 : SB8sro \\ & := 0 : SB9srsr := 0 : SB9srti := 0 : SB9sro := 98 : SB10srsr := 32 : \\ & SB10srti := 0 : SB10sro := 0 : SB11srsr := 0 : SB11srti := 0 : SB11sro \\ & := 169.5 : SB12srsr := 0 : SB12srti := 81.5 : SB12sro := 0 : SB13srsr \\ & := 136 : SB13srti := 0 : SB13sro := 0 : SB14srsr := 0 : SB14srti := 0 : \\ & SB14sro := 89 : SB15srsr := 144 : SB15srti := 0 : SB15sro := 0 : \\ & SB16srsr := 0 : SB16srti := 0 : SB16sro := 651 : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > SB1tISR := 0 : SB1titi := 0 : SB1tio := 0.125 : SB2tISR := 0.5 : SB2titi := 0 : \\ & SB2tio := 0 : SB3tISR := 0 : SB3titi := 2 : SB3tio := 0 : SB4tISR := 0 : \\ & SB4titi := 0 : SB4tio := 8.5 : SB5tISR := 0 : SB5titi := 8 : SB5tio := 0 : \\ & SB6tISR := 0 : SB6titi := 0 : SB6tio := 26.625 : SB7tISR := 41.5 : SB7titi \\ & := 0 : SB7tio := 0 : SB8tISR := 0 : SB8titi := 8 : SB8tio := 0 : SB9tISR \\ & := 0 : SB9titi := 0 : SB9tio := 48.5 : SB10tISR := 0 : SB10titi := 32 : \\ & SB10tio := 0 : SB11tISR := 0 : SB11titi := 0 : SB11tio := 185 : SB12tISR \\ & := 81.5 : SB12titi := 0 : SB12tio := 0 : SB13tISR := 0 : SB13titi := 136 : \\ & SB13tio := 0 : SB14tISR := 0 : SB14titi := 0 : SB14tio := 273 : SB15tISR \\ & := 0 : SB15titi := 144 : SB15tio := 0 : SB16tISR := 0 : SB16titi := 0 : \\ & SB16tio := 246.625 : SB17tISR := 354 : SB17titi := 0 : SB17tio := 0 : \\ & SB18tISR := 0 : SB18titi := 0 : SB18tio := 673.5 : SB19tISR := 0 : \\ & SB19titi := 128 : SB19tio := 0 : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > SB1osr := 0 : SB1oti := 0 : SB1oo := 0 : SB2osr := 0.25 : SB2oti := 0 : \\ & SB2oo := 0.25 : SB3osr := 0 : SB3oti := 0 : SB3oo := 2 : SB4osr := 0 : \\ & SB4oti := 4 : SB4oo := 0 : SB5osr := 0.5 : SB5oti := 0 : SB5oo \\ & := 8.5 : SB6osr := 0 : SB6oti := 0 : SB6oo := 8 : SB7osr := 0 : SB7oti \\ & := 8 : SB7oo := 0 : SB8osr := 20.5 : SB8oti := 0 : SB8oo := 20.5 : \\ & SB9osr := 0 : SB9oti := 0 : SB9oo := 8 : SB10osr := 0 : SB10oti := 0 : \\ & SB10oo := 4 : SB11osr := 41 : SB11oti := 0 : SB11oo := 57 : SB12osr \\ & := 0 : SB12oti := 0 : SB12oo := 32 : SB13osr := 0 : SB13oti := 72 : \\ & SB13oo := 0 : SB14osr := 20.75 : SB14oti := 0 : SB14oo := 148.75 : \\ & SB15osr := 0 : SB15oti := 0 : SB15oo := 136 : SB16osr := 0 : SB16oti \\ & := 136 : SB16oo := 0 : SB17osr := 40.5 : SB17oti := 0 : SB17oo \\ & := 48.5 : SB18osr := 0 : SB18oti := 0 : SB18oo := 144 : SB19osr := 0 : \\ & SB19oti := 64 : SB19oo := 0 : \end{aligned}$$

> *SC1srsr := 0 : SC1srti := 0 : SC1sro := 0.25 : SC2srsr := 0 : SC2srti := 0.5 : SC2sro := 0 : SC3srsr := 0 : SC3srti := 0 : SC3sro := 0 : SC4srsr := 0 : SC4srti := 0 : SC4sro := 4.5 : SC5srsr := 4 : SC5srti := 0 : SC5sro := 0 : SC6srsr := 0 : SC6srti := 0 : SC6sro := 4.5 : SC7srsr := 0 : SC7srti := 9.5 : SC7sro := 0 : SC8srsr := 8 : SC8srti := 0 : SC8sro := 0 : SC9srsr := 0 : SC9srti := 0 : SC9sro := 49 : SC10srsr := 0 : SC10srti := 0 : SC10sro := 0 : SC11srsr := 0 : SC11srti := 0 : SC11sro := 36.75 : SC12srsr := 0 : SC12srti := 49.5 : SC12sro := 0 : SC13srsr := 32 : SC13srti := 0 : SC13sro := 0 : SC14srsr := 0 : SC14srti := 0 : SC14sro := 76.5 : SC15srsr := 72 : SC15srti := 0 : SC15sro := 0 : SC16srsr := 0 : SC16srti := 0 : SC16sro := 181.5 :*

> *SC1tISR := 0 : SC1titi := 0 : SC1tio := 0 : SC2tISR := 0.5 : SC2titi := 0 : SC2tio := 0 : SC3tISR := 0 : SC3titi := 0 : SC3tio := 0 : SC4tISR := 0 : SC4titi := 0 : SC4tio := 2 : SC5tISR := 0 : SC5titi := 4 : SC5tio := 0 : SC6tISR := 0 : SC6titi := 0 : SC6tio := 12 : SC7tISR := 9.5 : SC7titi := 0 : SC7tio := 0 : SC8tISR := 0 : SC8titi := 8 : SC8tio := 0 : SC9tISR := 0 : SC9titi := 0 : SC9tio := 18 : SC10tISR := 0 : SC10titi := 0 : SC10tio := 0 : SC11tISR := 0 : SC11titi := 0 : SC11tio := 52 : SC12tISR := 49.5 : SC12titi := 0 : SC12tio := 0 : SC13tISR := 0 : SC13titi := 32 : SC13tio := 0 : SC14tISR := 0 : SC14titi := 0 : SC14tio := 84 : SC15tISR := 0 : SC15titi := 72 : SC15tio := 0 : SC16tISR := 0 : SC16titi := 0 : SC16tio := 72 : SC17tISR := 66 : SC17titi := 0 : SC17tio := 0 : SC18tISR := 0 : SC18titi := 0 : SC18tio := 294 : SC19tISR := 0 : SC19titi := 64 : SC19tio := 0 :*

> *SC1osr := 0 : SC1oti := 0 : SC1oo := 0 : SC2osr := 0 : SC2oti := 0 : SC2oo := 0.25 : SC3osr := 0 : SC3oti := 0 : SC3oo := 0 : SC4osr := 0 : SC4oti := 1 : SC4oo := 0 : SC5osr := 2 : SC5oti := 0 : SC5oo := 2.5 : SC6osr := 0 : SC6oti := 0 : SC6oo := 4 : SC7osr := 0 : SC7oti := 2 : SC7oo := 0 : SC8osr := 0 : SC8oti := 0 : SC8oo := 4.5 : SC9osr := 0 : SC9oti := 0 : SC9oo := 8 : SC10osr := 0 : SC10oti := 0 : SC10oo := 9 : SC11osr := 20 : SC11oti := 0 : SC11oo := 29 : SC12osr := 0 : SC12oti := 0 : SC12oo := 0 : SC13osr := 0 : SC13oti := 22 : SC13oo := 0 : SC14osr := 8 : SC14oti := 0 : SC14oo := 28.75 : SC15osr := 0 : SC15oti := 0 : SC15oo := 32 : SC16osr := 0 : SC16oti := 10 : SC16oo := 0 : SC17osr := 18 : SC17oti := 0 : SC17oo := 58.5 : SC18osr := 0 : SC18oti := 0 : SC18oo := 72 : SC19osr := 0 : SC19oti := 36 : SC19oo := 0 :*

> *SD1srsr := 0 : SD1srti := 0 : SD1sro := 4 : SD2srsr := 0 : SD2srti := 4 : SD2sro := 0 : SD3srsr := 4 : SD3srti := 0 : SD3sro := 0 : SD4srsr := 0 : SD4srti := 0 : SD4sro := 24 : SD5srsr := 16 : SD5srti := 0 : SD5sro := 0 : SD6srsr := 0 : SD6srti := 0 : SD6sro := 40 : SD7srsr := 0 : SD7srti := 44 : SD7sro := 0 : SD8srsr := 16 : SD8srti := 0 :*

$SD8sro := 0 : SD9srsr := 0 : SD9srti := 0 : SD9sro := 112 : SD10srsr$
 $:= 16 : SD10srti := 0 : SD10sro := 0 : SD11srsr := 0 : SD11srti := 0 :$
 $SD11sro := 108 : SD12srsr := 0 : SD12srti := 76 : SD12sro := 0 :$
 $SD13srsr := 80 : SD13srti := 0 : SD13sro := 0 : SD14srsr := 0 :$
 $SD14srti := 0 : SD14sro := 88 : SD15srsr := 96 : SD15srti := 0 :$
 $SD15sro := 0 : SD16srsr := 0 : SD16srti := 0 : SD16sro := 312 :$

$> SD1tISR := 0 : SD1titi := 0 : SD1tio := 1 : SD2tISR := 4 : SD2titi := 0 :$
 $SD2tio := 0 : SD3tISR := 0 : SD3titi := 4 : SD3tio := 0 : SD4tISR := 0 :$
 $SD4titi := 0 : SD4tio := 20 : SD5tISR := 0 : SD5titi := 16 : SD5tio$
 $:= 0 : SD6tISR := 0 : SD6titi := 0 : SD6tio := 45 : SD7tISR := 44 :$
 $SD7titi := 0 : SD7tio := 0 : SD8tISR := 0 : SD8titi := 16 : SD8tio$
 $:= 0 : SD9tISR := 0 : SD9titi := 0 : SD9tio := 52 : SD10tISR := 0 :$
 $SD10titi := 16 : SD10tio := 0 : SD11tISR := 0 : SD11titi := 0 : SD11tio$
 $:= 136 : SD12tISR := 76 : SD12titi := 0 : SD12tio := 0 : SD13tISR := 0 :$
 $SD13titi := 80 : SD13tio := 0 : SD14tISR := 0 : SD14titi := 0 : SD14tio$
 $:= 168 : SD15tISR := 0 : SD15titi := 96 : SD15tio := 0 : SD16tISR := 0 :$
 $SD16titi := 0 : SD16tio := 125 : SD17tISR := 144 : SD17titi := 0 :$
 $SD17tio := 0 : SD18tISR := 0 : SD18titi := 0 : SD18tio := 348 :$
 $SD19tISR := 0 : SD19titi := 64 : SD19tio := 0 :$

$> SD1osr := 0 : SD1oti := 0.5 : SD1oo := 0 : SD2osr := 1 : SD2oti := 0 :$
 $SD2oo := 3 : SD3osr := 0 : SD3oti := 0 : SD3oo := 4 : SD4osr := 0 :$
 $SD4oti := 6 : SD4oo := 0 : SD5osr := 10 : SD5oti := 0 : SD5oo$
 $:= 14 : SD6osr := 0 : SD6oti := 0 : SD6oo := 16 : SD7osr := 0 :$
 $SD7oti := 14.5 : SD7oo := 0 : SD8osr := 10 : SD8oti := 0 : SD8oo$
 $:= 30 : SD9osr := 0 : SD9oti := 0 : SD9oo := 16 : SD10osr := 0 :$
 $SD10oti := 0 : SD10oo := 22 : SD11osr := 36 : SD11oti := 0 : SD11oo$
 $:= 76 : SD12osr := 0 : SD12oti := 0 : SD12oo := 16 : SD13osr := 0 :$
 $SD13oti := 44 : SD13oo := 0 : SD14osr := 43 : SD14oti := 0 : SD14oo$
 $:= 65 : SD15osr := 0 : SD15oti := 0 : SD15oo := 80 : SD16osr := 0 :$
 $SD16oti := 44 : SD16oo := 0 : SD17osr := 26 : SD17oti := 0 : SD17oo$
 $:= 62 : SD18osr := 0 : SD18oti := 0 : SD18oo := 96 : SD19osr := 0 :$
 $SD19oti := 46.5 : SD19oo := 0 :$

#Calculating the parameter gamma γ_1

$> \gamma_{sr1} := \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs11^4} \cdot d4\phi111(rs11) \cdot SB1srsr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs11^5} \cdot SB1srsr \right. \right.$
 $\cdot ac^4 + \left. \frac{6}{rs11^3} \cdot SA1srsr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi111(rs11) + \left(\frac{15}{rs11^6} \cdot SB1srsr \cdot ac^4 \right.$
 $\left. - \frac{18}{rs11^4} \cdot SA1srsr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot msr1}{rs11^2} \right) \cdot d2\phi111(rs11) + \left(-\frac{15}{rs11^7} \right.$

$$\begin{aligned}
& \cdot SB1srsr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs11^5} \cdot SA1srsr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot msr1}{rs11^3} \Big) \cdot d1\phi111(rs11) \Big) \\
& + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs11^4} \cdot d4\phi112(rs11) \cdot SB1srti \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs11^5} \cdot SB1srti \cdot ac^4 \right. \right. \\
& + \frac{6}{rs11^3} \cdot SA1srti \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\phi112(rs11) + \left(\frac{15}{rs11^6} \cdot SB1srti \cdot ac^4 \right. \\
& - \frac{18}{rs11^4} \cdot SA1srti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lsr1}{rs11^2} \Big) \cdot d2\phi112(rs11) + \left(-\frac{15}{rs11^7} \cdot SB1srti \right. \\
& \cdot ac^4 + \frac{18}{rs11^5} \cdot SA1srti \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot lsr1}{rs11^3} \Big) \cdot d1\phi112(rs11) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs11^4} \right. \\
& \cdot d4\phi113(rs11) \cdot SB1sro \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs11^5} \cdot SB1sro \cdot ac^4 + \frac{6}{rs11^3} \cdot SA1sro \right. \\
& \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\phi113(rs11) + \left(\frac{15}{rs11^6} \cdot SB1sro \cdot ac^4 - \frac{18}{rs11^4} \cdot SA1sro \cdot ac^2 \right. \\
& + \frac{3 \cdot psr1}{rs11^2} \Big) \cdot d2\phi113(rs11) + \left(-\frac{15}{rs11^7} \cdot SB1sro \cdot ac^4 + \frac{18}{rs11^5} \cdot SA1sro \right. \\
& \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot psr1}{rs11^3} \Big) \cdot d1\phi113(rs11) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{sr2} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs12^4} \cdot d4\phi111(rs12) \cdot SB2srsr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs12^5} \cdot SB2srsr \right. \right. \\
& \cdot ac^4 + \frac{6}{rs12^3} \cdot SA2srsr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\phi111(rs12) + \left(\frac{15}{rs12^6} \cdot SB2srsr \cdot ac^4 \right. \\
& - \frac{18}{rs12^4} \cdot SA2srsr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot msr2}{rs12^2} \Big) \cdot d2\phi111(rs12) + \left(-\frac{15}{rs12^7} \right. \\
& \cdot SB2srsr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs12^5} \cdot SA2srsr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot msr2}{rs12^3} \Big) \cdot d1\phi111(rs12) \Big) \\
& + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs12^4} \cdot d4\phi112(rs12) \cdot SB2srti \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs12^5} \cdot SB2srti \cdot ac^4 \right. \right. \\
& + \frac{6}{rs12^3} \cdot SA2srti \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\phi112(rs12) + \left(\frac{15}{rs12^6} \cdot SB2srti \cdot ac^4 \right. \\
& - \frac{18}{rs12^4} \cdot SA2srti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lsr2}{rs12^2} \Big) \cdot d2\phi112(rs12) + \left(-\frac{15}{rs12^7} \cdot SB2srti \right. \\
& \cdot ac^4 + \frac{18}{rs12^5} \cdot SA2srti \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot lsr2}{rs12^3} \Big) \cdot d1\phi112(rs12) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs12^4} \right. \\
& \cdot d4\phi113(rs12) \cdot SB2sro \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs12^5} \cdot SB2sro \cdot ac^4 + \frac{6}{rs12^3} \cdot SA2sro \right. \\
& \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\phi113(rs12) + \left(\frac{15}{rs12^6} \cdot SB2sro \cdot ac^4 - \frac{18}{rs12^4} \cdot SA2sro \cdot ac^2 \right. \\
& + \frac{3 \cdot psr2}{rs12^2} \Big) \cdot d2\phi113(rs12) + \left(-\frac{15}{rs12^7} \cdot SB2sro \cdot ac^4 + \frac{18}{rs12^5} \cdot SA2sro \right.
\end{aligned}$$

$$\cdot ac^2 - \frac{3 \cdot psr2}{rs12^3} \cdot d1\phi113(rs12) \Big) :$$

$$\begin{aligned} > \gamma_{sr3} := \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs13^4} \cdot d4\phi111(rs13) \cdot SB3srsr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs13^5} \cdot SB3srsr \right. \right. \\ & \cdot ac^4 + \frac{6}{rs13^3} \cdot SA3srsr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\phi111(rs13) + \left(\frac{15}{rs13^6} \cdot SB3srsr \cdot ac^4 \right. \\ & \left. - \frac{18}{rs13^4} \cdot SA3srsr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot msr3}{rs13^2} \right) \cdot d2\phi111(rs13) + \left(-\frac{15}{rs13^7} \right. \\ & \left. \cdot SB3srsr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs13^5} \cdot SA3srsr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot msr3}{rs13^3} \right) \cdot d1\phi111(rs13) \Big) \\ & + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs13^4} \cdot d4\phi112(rs13) \cdot SB3srti \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs13^5} \cdot SB3srti \cdot ac^4 \right. \right. \\ & \left. + \frac{6}{rs13^3} \cdot SA3srti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi112(rs13) + \left(\frac{15}{rs13^6} \cdot SB3srti \cdot ac^4 \right. \\ & \left. - \frac{18}{rs13^4} \cdot SA3srti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lsr3}{rs13^2} \right) \cdot d2\phi112(rs13) + \left(-\frac{15}{rs13^7} \cdot SB3srti \right. \\ & \left. \cdot ac^4 + \frac{18}{rs13^5} \cdot SA3srti \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot lsr3}{rs13^3} \right) \cdot d1\phi112(rs13) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs13^4} \right. \\ & \cdot d4\phi113(rs13) \cdot SB3sro \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs13^5} \cdot SB3sro \cdot ac^4 + \frac{6}{rs13^3} \cdot SA3sro \right. \\ & \left. \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi113(rs13) + \left(\frac{15}{rs13^6} \cdot SB3sro \cdot ac^4 - \frac{18}{rs13^4} \cdot SA3sro \cdot ac^2 \right. \\ & \left. + \frac{3 \cdot psr3}{rs13^2} \right) \cdot d2\phi113(rs13) + \left(-\frac{15}{rs13^7} \cdot SB3sro \cdot ac^4 + \frac{18}{rs13^5} \cdot SA3sro \right. \\ & \left. \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot psr3}{rs13^3} \right) \cdot d1\phi113(rs13) \Big) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > \gamma_{sr4} := \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs14^4} \cdot d4\phi111(rs14) \cdot SB4srsr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs14^5} \cdot SB4srsr \right. \right. \\ & \cdot ac^4 + \frac{6}{rs14^3} \cdot SA4srsr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\phi111(rs14) + \left(\frac{15}{rs14^6} \cdot SB4srsr \cdot ac^4 \right. \\ & \left. - \frac{18}{rs14^4} \cdot SA4srsr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot msr4}{rs14^2} \right) \cdot d2\phi111(rs14) + \left(-\frac{15}{rs14^7} \right. \\ & \left. \cdot SB4srsr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs14^5} \cdot SA4srsr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot msr4}{rs14^3} \right) \cdot d1\phi111(rs14) \Big) \\ & + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs14^4} \cdot d4\phi112(rs14) \cdot SB4srti \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs14^5} \cdot SB4srti \cdot ac^4 \right. \right. \\ & \left. + \frac{6}{rs14^3} \cdot SA4srti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi112(rs14) + \left(\frac{15}{rs14^6} \cdot SB4srti \cdot ac^4 \right. \\ & \left. - \frac{18}{rs14^4} \cdot SA4srti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lsr4}{rs14^2} \right) \cdot d2\phi112(rs14) + \left(-\frac{15}{rs14^7} \cdot SB4srti \right. \\ & \left. \cdot ac^4 + \frac{18}{rs14^5} \cdot SA4srti \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot lsr4}{rs14^3} \right) \cdot d1\phi112(rs14) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs14^4} \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \cdot d4\varphi113(rs14) \cdot SB4sro \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs14^5} \cdot SB4sro \cdot ac^4 + \frac{6}{rs14^3} \cdot SA4sro \right. \\ & \cdot ac^2 \left. \right) \cdot d3\varphi113(rs14) + \left(\frac{15}{rs14^6} \cdot SB4sro \cdot ac^4 - \frac{18}{rs14^4} \cdot SA4sro \cdot ac^2 \right. \\ & \left. + \frac{3 \cdot psr4}{rs14^2} \right) \cdot d2\varphi113(rs14) + \left(-\frac{15}{rs14^7} \cdot SB4sro \cdot ac^4 + \frac{18}{rs12^5} \cdot SA4sro \right. \\ & \left. \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot psr4}{rs14^3} \right) \cdot d1\varphi113(rs14) \Big) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > \gamma_{sr5} := \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs15^4} \cdot d4\varphi111(rs15) \cdot SB5srsr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs15^5} \cdot SB5srsr \right. \right. \\ & \cdot ac^4 + \frac{6}{rs15^3} \cdot SA5srsr \cdot ac^2 \left. \right) \cdot d3\varphi111(rs15) + \left(\frac{15}{rs15^6} \cdot SB5srsr \cdot ac^4 \right. \\ & \left. - \frac{18}{rs15^4} \cdot SA5srsr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot msr5}{rs15^2} \right) \cdot d2\varphi111(rs15) + \left(-\frac{15}{rs15^7} \right. \\ & \left. \cdot SB5srsr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs15^5} \cdot SA5srsr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot msr5}{rs15^3} \right) \cdot d1\varphi111(rs15) \Big) \\ & + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs15^4} \cdot d4\varphi112(rs15) \cdot SB5srti \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs15^5} \cdot SB5srti \cdot ac^4 \right. \right. \\ & \left. + \frac{6}{rs15^3} \cdot SA5srti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi112(rs15) + \left(\frac{15}{rs15^6} \cdot SB5srti \cdot ac^4 \right. \\ & \left. - \frac{18}{rs15^4} \cdot SA5srti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lsr5}{rs15^2} \right) \cdot d2\varphi112(rs15) + \left(-\frac{15}{rs15^7} \cdot SB5srti \right. \\ & \left. \cdot ac^4 + \frac{18}{rs15^5} \cdot SA5srti \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot lsr5}{rs15^3} \right) \cdot d1\varphi112(rs15) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs15^4} \right. \\ & \cdot d4\varphi113(rs15) \cdot SB5sro \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs15^5} \cdot SB5sro \cdot ac^4 + \frac{6}{rs15^3} \cdot SA5sro \right. \\ & \cdot ac^2 \left. \right) \cdot d3\varphi113(rs15) + \left(\frac{15}{rs15^6} \cdot SB5sro \cdot ac^4 - \frac{18}{rs15^4} \cdot SA5sro \cdot ac^2 \right. \\ & \left. + \frac{3 \cdot psr5}{rs15^2} \right) \cdot d2\varphi113(rs15) + \left(-\frac{15}{rs15^7} \cdot SB5sro \cdot ac^4 + \frac{18}{rs15^5} \cdot SA5sro \right. \\ & \left. \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot psr5}{rs15^3} \right) \cdot d1\varphi113(rs15) \Big) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > \gamma_{sr6} := \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs16^4} \cdot d4\varphi111(rs16) \cdot SB6srsr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs16^5} \cdot SB6srsr \right. \right. \\ & \cdot ac^4 + \frac{6}{rs16^3} \cdot SA6srsr \cdot ac^2 \left. \right) \cdot d3\varphi111(rs16) + \left(\frac{15}{rs16^6} \cdot SB6srsr \cdot ac^4 \right. \\ & \left. - \frac{18}{rs16^4} \cdot SA6srsr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot msr6}{rs16^2} \right) \cdot d2\varphi111(rs16) + \left(-\frac{15}{rs16^7} \right. \\ & \left. \cdot SB6srsr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs16^5} \cdot SA6srsr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot msr6}{rs16^3} \right) \cdot d1\varphi111(rs16) \Big) \\ & + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs16^4} \cdot d4\varphi112(rs16) \cdot SB6srti \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs16^5} \cdot SB6srti \cdot ac^4 \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{6}{rs16^3} \cdot SA6srti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi112(rs16) + \left(\frac{15}{rs16^6} \cdot SB6srti \cdot ac^4 \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{18}{rs16^4} \cdot SA6srti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lsr6}{rs16^2} \right) \cdot d2\varphi112(rs16) + \left(-\frac{15}{rs16^7} \cdot SB6srti \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot ac^4 + \frac{18}{rs16^5} \cdot SA6srti \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot lsr6}{rs16^3} \right) \cdot d1\varphi112(rs16) \right) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs16^4} \right. \\ & \cdot d4\varphi113(rs16) \cdot SB6sro \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs16^5} \cdot SB6sro \cdot ac^4 + \frac{6}{rs16^3} \cdot SA6sro \right. \\ & \cdot ac^2 \left. \right) \cdot d3\varphi113(rs16) + \left(\frac{15}{rs16^6} \cdot SB6sro \cdot ac^4 - \frac{18}{rs16^4} \cdot SA6sro \cdot ac^2 \right. \\ & \left. + \frac{3 \cdot psr6}{rs16^2} \right) \cdot d2\varphi113(rs16) + \left(-\frac{15}{rs16^7} \cdot SB6sro \cdot ac^4 + \frac{18}{rs16^5} \cdot SA6sro \right. \\ & \left. \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot psr6}{rs16^3} \right) \cdot d1\varphi113(rs16) \Big) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{6}{rs16^3} \cdot SA6srti \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi112(rs16) + \left(\frac{15}{rs16^6} \cdot SB6srti \cdot ac^4 \right. \\
& - \frac{18}{rs16^4} \cdot SA6srti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lsr6}{rs16^2} \Big) \cdot d2\varphi112(rs16) + \left(-\frac{15}{rs16^7} \cdot SB6srti \right. \\
& \cdot ac^4 + \frac{18}{rs16^5} \cdot SA6srti \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot lsr6}{rs16^3} \Big) \cdot d1\varphi112(rs16) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs16^4} \right. \\
& \cdot d4\varphi113(rs16) \cdot SB6sro \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs16^5} \cdot SB6sro \cdot ac^4 + \frac{6}{rs16^3} \cdot SA6sro \right. \\
& \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi113(rs16) + \left(\frac{15}{rs16^6} \cdot SB6sro \cdot ac^4 - \frac{18}{rs16^4} \cdot SA6sro \cdot ac^2 \right. \\
& + \frac{3 \cdot psr6}{rs16^2} \Big) \cdot d2\varphi113(rs16) + \left(-\frac{15}{rs16^7} \cdot SB6sro \cdot ac^4 + \frac{18}{rs16^5} \cdot SA6sro \right. \\
& \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot psr6}{rs16^3} \Big) \cdot d1\varphi113(rs16) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{sr7} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs17^4} \cdot d4\varphi111(rs17) \cdot SB7srsr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs17^5} \cdot SB7srsr \right. \right. \\
& \cdot ac^4 + \frac{6}{rs17^3} \cdot SA7srsr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi111(rs17) + \left(\frac{15}{rs17^6} \cdot SB7srsr \cdot ac^4 \right. \\
& - \frac{18}{rs17^4} \cdot SA7srsr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot msr7}{rs17^2} \Big) \cdot d2\varphi111(rs17) + \left(-\frac{15}{rs17^7} \right. \\
& \cdot SB7srsr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs17^5} \cdot SA7srsr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot msr7}{rs17^3} \Big) \cdot d1\varphi111(rs17) \Big) \\
& + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs17^4} \cdot d4\varphi112(rs17) \cdot SB7srti \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs17^5} \cdot SB7srti \cdot ac^4 \right. \right. \\
& + \frac{6}{rs17^3} \cdot SA7srti \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi112(rs17) + \left(\frac{15}{rs17^6} \cdot SB7srti \cdot ac^4 \right. \\
& - \frac{18}{rs17^4} \cdot SA7srti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lsr7}{rs17^2} \Big) \cdot d2\varphi112(rs17) + \left(-\frac{15}{rs17^7} \cdot SB7srti \right. \\
& \cdot ac^4 + \frac{18}{rs17^5} \cdot SA7srti \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot lsr7}{rs17^3} \Big) \cdot d1\varphi112(rs17) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs17^4} \right. \\
& \cdot d4\varphi113(rs17) \cdot SB7sro \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs17^5} \cdot SB7sro \cdot ac^4 + \frac{6}{rs17^3} \cdot SA7sro \right. \\
& \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi113(rs17) + \left(\frac{15}{rs17^6} \cdot SB7sro \cdot ac^4 - \frac{18}{rs17^4} \cdot SA7sro \cdot ac^2 \right. \\
& + \frac{3 \cdot psr7}{rs17^2} \Big) \cdot d2\varphi113(rs17) + \left(-\frac{15}{rs17^7} \cdot SB7sro \cdot ac^4 + \frac{18}{rs17^5} \cdot SA7sro \right. \\
& \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot psr7}{rs17^3} \Big) \cdot d1\varphi113(rs17) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{sr8} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs18^4} \cdot d4\varphi111(rs18) \cdot SB8srsr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs18^5} \cdot SB8srsr \right. \right. \\
& \cdot ac^4 + \frac{6}{rs18^3} \cdot SA8srsr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi111(rs18) + \left(\frac{15}{rs18^6} \cdot SB8srsr \cdot ac^4 \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{18}{rs18^4} \cdot SA8srsr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot msr8}{rs18^2} \Big) \cdot d2\varphi111(rs18) + \left(-\frac{15}{rs18^7} \right. \\
& \cdot SB8srsr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs18^5} \cdot SA8srsr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot msr8}{rs18^3} \Big) \cdot d1\varphi111(rs18) \Big) \\
& + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs18^4} \cdot d4\varphi112(rs18) \cdot SB8srti \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs18^5} \cdot SB8srti \cdot ac^4 \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{6}{rs18^3} \cdot SA8srti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi112(rs18) + \left(\frac{15}{rs18^6} \cdot SB8srti \cdot ac^4 \right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{18}{rs18^4} \cdot SA8srti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lsr8}{rs18^2} \right) \cdot d2\varphi112(rs18) + \left(-\frac{15}{rs18^7} \cdot SB8srti \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot ac^4 + \frac{18}{rs18^5} \cdot SA8srti \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot lsr8}{rs18^3} \right) \cdot d1\varphi112(rs18) \right) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs18^4} \right. \\
& \cdot d4\varphi113(rs18) \cdot SB8sro \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs18^5} \cdot SB8sro \cdot ac^4 + \frac{6}{rs18^3} \cdot SA8sro \right. \\
& \left. \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi113(rs18) + \left(\frac{15}{rs18^6} \cdot SB8sro \cdot ac^4 - \frac{18}{rs18^4} \cdot SA8sro \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{3 \cdot psr8}{rs18^2} \right) \cdot d2\varphi113(rs18) + \left(-\frac{15}{rs18^7} \cdot SB8sro \cdot ac^4 + \frac{18}{rs18^5} \cdot SA8sro \right. \\
& \left. \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot psr8}{rs18^3} \right) \cdot d1\varphi113(rs18) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{sr9} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs19^4} \cdot d4\varphi111(rs19) \cdot SB9srsr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs19^5} \cdot SB9srsr \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot ac^4 + \frac{6}{rs19^3} \cdot SA9srsr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi111(rs19) + \left(\frac{15}{rs19^6} \cdot SB9srsr \cdot ac^4 \right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{18}{rs19^4} \cdot SA9srsr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot msr9}{rs19^2} \right) \cdot d2\varphi111(rs19) + \left(-\frac{15}{rs19^7} \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot SB9srsr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs19^5} \cdot SA9srsr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot msr9}{rs19^3} \right) \cdot d1\varphi111(rs19) \right) \\
& + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs19^4} \cdot d4\varphi112(rs19) \cdot SB9srti \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs19^5} \cdot SB9srti \cdot ac^4 \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{6}{rs19^3} \cdot SA9srti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi112(rs19) + \left(\frac{15}{rs19^6} \cdot SB9srti \cdot ac^4 \right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{18}{rs19^4} \cdot SA9srti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lsr9}{rs19^2} \right) \cdot d2\varphi112(rs19) + \left(-\frac{15}{rs19^7} \cdot SB9srti \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot ac^4 + \frac{18}{rs19^5} \cdot SA9srti \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot lsr9}{rs19^3} \right) \cdot d1\varphi112(rs19) \right) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs19^4} \right. \\
& \cdot d4\varphi113(rs19) \cdot SB9sro \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs19^5} \cdot SB9sro \cdot ac^4 + \frac{6}{rs19^3} \cdot SA9sro \right. \\
& \left. \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi113(rs19) + \left(\frac{15}{rs19^6} \cdot SB9sro \cdot ac^4 - \frac{18}{rs19^4} \cdot SA9sro \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{3 \cdot psr9}{rs19^2} \right) \cdot d2\varphi113(rs19) + \left(-\frac{15}{rs19^7} \cdot SB9sro \cdot ac^4 + \frac{18}{rs19^5} \cdot SA9sro \right.
\end{aligned}$$

$$\cdot ac^2 - \frac{3 \cdot psr9}{rs19^3} \Big) \cdot d1\varphi113(rs19) \Big) :$$

$$\begin{aligned} > \gamma_{sr10} := \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs110^4} \cdot d4\varphi111(rs110) \cdot SB10srsr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs110^5} \right. \right. \\ & \cdot SB10srsr \cdot ac^4 + \frac{6}{rs110^3} \cdot SA10srsr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi111(rs110) + \left(\frac{15}{rs110^6} \right. \\ & \cdot SB10srsr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs110^4} \cdot SA10srsr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot msr10}{rs110^2} \Big) \cdot d2\varphi111(rs110) \\ & + \left(-\frac{15}{rs110^7} \cdot SB10srsr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs110^5} \cdot SA10srsr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot msr10}{rs110^3} \right) \\ & \cdot d1\varphi111(rs110) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs110^4} \cdot d4\varphi112(rs110) \cdot SB10sr ti \cdot ac^4 + \left(\right. \right. \\ & - \frac{6}{rs110^5} \cdot SB10sr ti \cdot ac^4 + \frac{6}{rs110^3} \cdot SA10sr ti \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi112(rs110) \\ & + \left(\frac{15}{rs110^6} \cdot SB10sr ti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs110^4} \cdot SA10sr ti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lsr10}{rs110^2} \right) \\ & \cdot d2\varphi112(rs110) + \left(-\frac{15}{rs110^7} \cdot SB10sr ti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs110^5} \cdot SA10sr ti \cdot ac^2 \right. \\ & \left. - \frac{3 \cdot lsr10}{rs110^3} \right) \cdot d1\varphi112(rs110) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs110^4} \cdot d4\varphi113(rs110) \right. \\ & \cdot SB10sro \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs110^5} \cdot SB10sro \cdot ac^4 + \frac{6}{rs110^3} \cdot SA10sro \cdot ac^2 \right) \\ & \cdot d3\varphi113(rs110) + \left(\frac{15}{rs110^6} \cdot SB10sro \cdot ac^4 - \frac{18}{rs110^4} \cdot SA10sro \cdot ac^2 \right. \\ & \left. + \frac{3 \cdot psr10}{rs110^2} \right) \cdot d2\varphi113(rs110) + \left(-\frac{15}{rs110^7} \cdot SB10sro \cdot ac^4 + \frac{18}{rs110^5} \right. \\ & \left. \cdot SA10sro \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot psr10}{rs110^3} \right) \cdot d1\varphi113(rs110) \Big) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > \gamma_{sr11} := \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs111^4} \cdot d4\varphi111(rs111) \cdot SB11srsr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs111^5} \right. \right. \\ & \cdot SB11srsr \cdot ac^4 + \frac{6}{rs111^3} \cdot SA11srsr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi111(rs111) + \left(\frac{15}{rs111^6} \right. \\ & \cdot SB11srsr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs111^4} \cdot SA11srsr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot msr11}{rs111^2} \Big) \cdot d2\varphi111(rs111) \\ & + \left(-\frac{15}{rs111^7} \cdot SB11srsr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs111^5} \cdot SA11srsr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot msr11}{rs111^3} \right) \\ & \cdot d1\varphi111(rs111) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs111^4} \cdot d4\varphi112(rs111) \cdot SB11sr ti \cdot ac^4 + \left(\right. \right. \\ & - \frac{6}{rs111^5} \cdot SB11sr ti \cdot ac^4 + \frac{6}{rs111^3} \cdot SA11sr ti \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi112(rs111) \\ & + \left(\frac{15}{rs111^6} \cdot SB11sr ti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs111^4} \cdot SA11sr ti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lsr11}{rs111^2} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot d2\varphi112(rs111) + \left(-\frac{15}{rs111^7} \cdot SB11srti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs111^5} \cdot SA11srti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{3 \cdot lsr11}{rs111^3} \right) \cdot d1\varphi112(rs111) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs111^4} \cdot d4\varphi113(rs111) \right. \\
& \cdot SB11sro \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs111^5} \cdot SB11sro \cdot ac^4 + \frac{6}{rs111^3} \cdot SA11sro \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi113(rs111) + \left(\frac{15}{rs111^6} \cdot SB11sro \cdot ac^4 - \frac{18}{rs111^4} \cdot SA11sro \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{3 \cdot psr11}{rs111^2} \right) \cdot d2\varphi113(rs111) + \left(-\frac{15}{rs111^7} \cdot SB11sro \cdot ac^4 + \frac{18}{rs111^5} \right. \\
& \left. \cdot SA11sro \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot psr11}{rs111^3} \right) \cdot d1\varphi113(rs111) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{sr12} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs112^4} \cdot d4\varphi111(rs112) \cdot SB12srsr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs112^5} \right. \right. \\
& \cdot SB12srsr \cdot ac^4 + \frac{6}{rs112^3} \cdot SA12srsr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi111(rs112) + \left(\frac{15}{rs112^6} \right. \\
& \cdot SB12srsr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs112^4} \cdot SA12srsr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot msr12}{rs112^2} \Big) \cdot d2\varphi111(rs112) \\
& + \left(-\frac{15}{rs112^7} \cdot SB12srsr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs112^5} \cdot SA12srsr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot msr12}{rs112^3} \right) \\
& \cdot d1\varphi111(rs112) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs112^4} \cdot d4\varphi112(rs112) \cdot SB12srti \cdot ac^4 + \left(\right. \right. \\
& - \frac{6}{rs112^5} \cdot SB12srti \cdot ac^4 + \frac{6}{rs112^3} \cdot SA12srti \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi112(rs112) \\
& + \left(\frac{15}{rs112^6} \cdot SB12srti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs112^4} \cdot SA12srti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lsr12}{rs112^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi112(rs112) + \left(-\frac{15}{rs112^7} \cdot SB12srti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs112^5} \cdot SA12srti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{3 \cdot lsr12}{rs112^3} \right) \cdot d1\varphi112(rs112) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs112^4} \cdot d4\varphi113(rs112) \right. \\
& \cdot SB12sro \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs112^5} \cdot SB12sro \cdot ac^4 + \frac{6}{rs112^3} \cdot SA12sro \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi113(rs112) + \left(\frac{15}{rs112^6} \cdot SB12sro \cdot ac^4 - \frac{18}{rs112^4} \cdot SA12sro \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{3 \cdot psr12}{rs112^2} \right) \cdot d2\varphi113(rs112) + \left(-\frac{15}{rs112^7} \cdot SB12sro \cdot ac^4 + \frac{18}{rs112^5} \right. \\
& \left. \cdot SA12sro \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot psr12}{rs112^3} \right) \cdot d1\varphi113(rs112) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{sr13} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs113^4} \cdot d4\varphi111(rs113) \cdot SB13srsr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs113^5} \right. \right. \\
& \cdot SB13srsr \cdot ac^4 + \frac{6}{rs113^3} \cdot SA13srsr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi111(rs113) + \left(\frac{15}{rs113^6} \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot SB13srsr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs113^4} \cdot SA13srsr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot msr13}{rs113^2} \Big) \cdot d2\phi111(rs113) \\
& + \left(-\frac{15}{rs113^7} \cdot SB13srsr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs113^5} \cdot SA13srsr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot msr13}{rs113^3} \right) \\
& \cdot d1\phi111(rs113) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs113^4} \cdot d4\phi112(rs113) \cdot SB13srti \cdot ac^4 + \left(\right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{6}{rs113^5} \cdot SB13srti \cdot ac^4 + \frac{6}{rs113^3} \cdot SA13srti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi112(rs113) \right. \\
& \left. + \left(\frac{15}{rs113^6} \cdot SB13srti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs113^4} \cdot SA13srti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lsr13}{rs113^2} \right) \right. \\
& \cdot d2\phi112(rs113) + \left(-\frac{15}{rs113^7} \cdot SB13srti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs113^5} \cdot SA13srti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{3 \cdot lsr13}{rs113^3} \right) \cdot d1\phi112(rs113) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs113^4} \cdot d4\phi113(rs113) \right. \\
& \cdot SB13sro \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs113^5} \cdot SB13sro \cdot ac^4 + \frac{6}{rs113^3} \cdot SA13sro \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\phi113(rs113) + \left(\frac{15}{rs113^6} \cdot SB13sro \cdot ac^4 - \frac{18}{rs113^4} \cdot SA13sro \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{3 \cdot psr13}{rs113^2} \right) \cdot d2\phi113(rs113) + \left(-\frac{15}{rs113^7} \cdot SB13sro \cdot ac^4 + \frac{18}{rs113^5} \right. \\
& \left. \cdot SA13sro \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot psr13}{rs113^3} \right) \cdot d1\phi113(rs113) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{sr14} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs114^4} \cdot d4\phi111(rs114) \cdot SB14srsr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs114^5} \right. \right. \\
& \cdot SB14srsr \cdot ac^4 + \frac{6}{rs114^3} \cdot SA14srsr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\phi111(rs114) + \left(\frac{15}{rs114^6} \right. \\
& \cdot SB14srsr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs114^4} \cdot SA14srsr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot msr14}{rs114^2} \Big) \cdot d2\phi111(rs114) \\
& + \left(-\frac{15}{rs114^7} \cdot SB14srsr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs114^5} \cdot SA14srsr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot msr14}{rs114^3} \right) \\
& \cdot d1\phi111(rs114) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs114^4} \cdot d4\phi112(rs114) \cdot SB14srti \cdot ac^4 + \left(\right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{6}{rs114^5} \cdot SB14srti \cdot ac^4 + \frac{6}{rs114^3} \cdot SA14srti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi112(rs114) \right. \\
& \left. + \left(\frac{15}{rs114^6} \cdot SB14srti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs114^4} \cdot SA14srti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lsr14}{rs114^2} \right) \right. \\
& \cdot d2\phi112(rs114) + \left(-\frac{15}{rs114^7} \cdot SB14srti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs114^5} \cdot SA14srti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{3 \cdot lsr14}{rs114^3} \right) \cdot d1\phi112(rs114) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs114^4} \cdot d4\phi113(rs114) \right. \\
& \cdot SB14sro \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs114^5} \cdot SB14sro \cdot ac^4 + \frac{6}{rs114^3} \cdot SA14sro \cdot ac^2 \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \cdot d3\varphi113(rs114) + \left(\frac{15}{rs114^6} \cdot SB14sro \cdot ac^4 - \frac{18}{rs114^4} \cdot SA14sro \cdot ac^2 \right. \\ & \left. + \frac{3 \cdot psr14}{rs114^2} \right) \cdot d2\varphi113(rs114) + \left(-\frac{15}{rs114^7} \cdot SB14sro \cdot ac^4 + \frac{18}{rs114^5} \right. \\ & \left. \cdot SA14sro \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot psr14}{rs114^3} \right) \cdot d1\varphi113(rs114) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > \gamma_{sr15} := \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs115^4} \cdot d4\varphi111(rs115) \cdot SB15srsr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs115^5} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot SB15srsr \cdot ac^4 + \frac{6}{rs115^3} \cdot SA15srsr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi111(rs115) + \left(\frac{15}{rs115^6} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot SB15srsr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs115^4} \cdot SA15srsr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot msr15}{rs115^2} \right) \cdot d2\varphi111(rs115) \right. \\ & \left. + \left(-\frac{15}{rs115^7} \cdot SB15srsr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs115^5} \cdot SA15srsr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot msr15}{rs115^3} \right) \right. \\ & \left. \cdot d1\varphi111(rs115) \right) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs115^4} \cdot d4\varphi112(rs115) \cdot SB15srti \cdot ac^4 + \left(\right. \right. \\ & \left. \left. -\frac{6}{rs115^5} \cdot SB15srti \cdot ac^4 + \frac{6}{rs115^3} \cdot SA15srti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi112(rs115) \right. \\ & \left. + \left(\frac{15}{rs115^6} \cdot SB15srti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs115^4} \cdot SA15srti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lsr15}{rs115^2} \right) \right. \\ & \left. \cdot d2\varphi112(rs115) + \left(-\frac{15}{rs115^7} \cdot SB15srti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs115^5} \cdot SA15srti \cdot ac^2 \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{3 \cdot lsr15}{rs115^3} \right) \cdot d1\varphi112(rs115) \right) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs115^4} \cdot d4\varphi113(rs115) \right. \\ & \left. \cdot SB15sro \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs115^5} \cdot SB15sro \cdot ac^4 + \frac{6}{rs115^3} \cdot SA15sro \cdot ac^2 \right) \right. \\ & \left. \cdot d3\varphi113(rs115) + \left(\frac{15}{rs115^6} \cdot SB15sro \cdot ac^4 - \frac{18}{rs115^4} \cdot SA15sro \cdot ac^2 \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{3 \cdot psr15}{rs115^2} \right) \cdot d2\varphi113(rs115) + \left(-\frac{15}{rs115^7} \cdot SB15sro \cdot ac^4 + \frac{18}{rs115^5} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot SA15sro \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot psr15}{rs115^3} \right) \cdot d1\varphi113(rs115) \right) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > \gamma_{sr16} := \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs116^4} \cdot d4\varphi111(rs116) \cdot SB16srsr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs116^5} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot SB16srsr \cdot ac^4 + \frac{6}{rs116^3} \cdot SA16srsr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi111(rs116) + \left(\frac{15}{rs116^6} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot SB16srsr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs116^4} \cdot SA16srsr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot msr16}{rs116^2} \right) \cdot d2\varphi111(rs116) \right. \\ & \left. + \left(-\frac{15}{rs116^7} \cdot SB16srsr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs116^5} \cdot SA16srsr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot msr16}{rs116^3} \right) \right. \\ & \left. \cdot d1\varphi111(rs116) \right) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs116^4} \cdot d4\varphi112(rs116) \cdot SB16srti \cdot ac^4 + \left(\right. \right. \\ & \left. \left. -\frac{6}{rs116^5} \cdot SB16srti \cdot ac^4 + \frac{6}{rs116^3} \cdot SA16srti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi112(rs116) \right. \\ & \left. + \left(\frac{15}{rs116^6} \cdot SB16srti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs116^4} \cdot SA16srti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lsr16}{rs116^2} \right) \right. \\ & \left. \cdot d2\varphi112(rs116) + \left(-\frac{15}{rs116^7} \cdot SB16srti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs116^5} \cdot SA16srti \cdot ac^2 \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{3 \cdot lsr16}{rs116^3} \right) \cdot d1\varphi112(rs116) \right) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs116^4} \cdot d4\varphi113(rs116) \right. \\ & \left. \cdot SB16sro \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs116^5} \cdot SB16sro \cdot ac^4 + \frac{6}{rs116^3} \cdot SA16sro \cdot ac^2 \right) \right. \\ & \left. \cdot d3\varphi113(rs116) + \left(\frac{15}{rs116^6} \cdot SB16sro \cdot ac^4 - \frac{18}{rs116^4} \cdot SA16sro \cdot ac^2 \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{3 \cdot psr16}{rs116^2} \right) \cdot d2\varphi113(rs116) + \left(-\frac{15}{rs116^7} \cdot SB16sro \cdot ac^4 + \frac{18}{rs116^5} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot SA16sro \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot psr16}{rs116^3} \right) \cdot d1\varphi113(rs116) \right) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{6}{rs116^5} \cdot SB16srti \cdot ac^4 + \frac{6}{rs116^3} \cdot SA16srti \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi112(rs116) \\
& + \left(\frac{15}{rs116^6} \cdot SB16srti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs116^4} \cdot SA16srti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lsr16}{rs116^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi112(rs116) + \left(-\frac{15}{rs116^7} \cdot SB16srti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs116^5} \cdot SA16srti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{3 \cdot lsr16}{rs116^3} \right) \cdot d1\varphi112(rs116) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs116^4} \cdot d4\varphi113(rs116) \right. \\
& \cdot SB16sro \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs116^5} \cdot SB16sro \cdot ac^4 + \frac{6}{rs116^3} \cdot SA16sro \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi113(rs116) + \left(\frac{15}{rs116^6} \cdot SB16sro \cdot ac^4 - \frac{18}{rs116^4} \cdot SA16sro \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{3 \cdot psr16}{rs116^2} \right) \cdot d2\varphi113(rs116) + \left(-\frac{15}{rs116^7} \cdot SB16sro \cdot ac^4 + \frac{18}{rs116^5} \right. \\
& \left. \cdot SA16sro \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot psr16}{rs116^3} \right) \cdot d1\varphi113(rs116) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{sr} := & \gamma_{sr1} + \gamma_{sr2} + \gamma_{sr3} + \gamma_{sr4} + \gamma_{sr5} + \gamma_{sr6} + \gamma_{sr7} + \gamma_{sr8} \\
& + \gamma_{sr9} + \gamma_{sr10} + \gamma_{sr11} + \gamma_{sr12} + \gamma_{sr13} + \gamma_{sr14} + \gamma_{sr15} \\
& + \gamma_{sr16} :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{til} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs21^4} \cdot d4\varphi221(rs21) \cdot SB1tistr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs21^5} \cdot SB1tistr \cdot ac^4 \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{6}{rs21^3} \cdot SA1tistr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi221(rs21) + \left(\frac{15}{rs21^6} \cdot SB1tistr \cdot ac^4 \right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{18}{rs21^4} \cdot SA1tistr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mt1l}{rs21^2} \right) \cdot d2\varphi221(rs21) + \left(-\frac{15}{rs21^7} \cdot SB1tistr \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot ac^4 + \frac{18}{rs21^5} \cdot SA1tistr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mt1l}{rs21^3} \right) \cdot d1\varphi221(rs21) \right) + \frac{1}{48} \\
& \cdot \left(\frac{1}{rs21^4} \cdot d4\varphi222(rs21) \cdot SB1titi \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs21^5} \cdot SB1titi \cdot ac^4 + \frac{6}{rs21^3} \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot SA1titi \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi222(rs21) + \left(\frac{15}{rs21^6} \cdot SB1titi \cdot ac^4 - \frac{18}{rs21^4} \cdot SA1titi \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lti1}{rs21^2} \right) \cdot d2\varphi222(rs21) + \left(-\frac{15}{rs21^7} \cdot SB1titi \cdot ac^4 + \frac{18}{rs21^5} \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot SA1titi \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot lti1}{rs21^3} \right) \cdot d1\varphi222(rs21) \right) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs21^4} \right. \\
& \left. \cdot d4\varphi223(rs21) \cdot SB1tio \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs21^5} \cdot SB1tio \cdot ac^4 + \frac{6}{rs21^3} \cdot SA1tio \right. \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \cdot ac^2) \cdot d3\varphi223(rs21) + \left(\frac{15}{rs21^6} \cdot SB1tio \cdot ac^4 - \frac{18}{rs21^4} \cdot SA1tio \cdot ac^2 \right. \\ & \left. + \frac{3 \cdot pt1l}{rs21^2} \right) \cdot d2\varphi223(rs21) + \left(-\frac{15}{rs21^7} \cdot SB1tio \cdot ac^4 + \frac{18}{rs21^5} \cdot SA1tio \right. \\ & \left. \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot pt1l}{rs21^3} \right) \cdot d1\varphi223(rs21) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > \gamma_{ti2} := \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs22^4} \cdot d4\varphi221(rs22) \cdot SB2tistr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs22^5} \cdot SB2tistr \cdot ac^4 \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{6}{rs22^3} \cdot SA2tistr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi221(rs22) + \left(\frac{15}{rs22^6} \cdot SB2tistr \cdot ac^4 \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{18}{rs22^4} \cdot SA2tistr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mti2}{rs22^2} \right) \cdot d2\varphi221(rs22) + \left(-\frac{15}{rs22^7} \cdot SB2tistr \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot ac^4 + \frac{18}{rs22^5} \cdot SA2tistr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mti2}{rs22^3} \right) \cdot d1\varphi221(rs22) \right) + \frac{1}{48} \\ & \cdot \left(\frac{1}{rs22^4} \cdot d4\varphi222(rs22) \cdot SB2titi \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs22^5} \cdot SB2titi \cdot ac^4 + \frac{6}{rs22^3} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot SA2titi \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi222(rs22) + \left(\frac{15}{rs22^6} \cdot SB2titi \cdot ac^4 - \frac{18}{rs22^4} \cdot SA2titi \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lti2}{rs22^2} \right) \cdot d2\varphi222(rs22) + \left(-\frac{15}{rs22^7} \cdot SB2titi \cdot ac^4 + \frac{18}{rs22^5} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot SA2titi \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot lti2}{rs22^3} \right) \cdot d1\varphi222(rs22) \right) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs22^4} \right. \\ & \left. \cdot d4\varphi223(rs22) \cdot SB2tio \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs22^5} \cdot SB2tio \cdot ac^4 + \frac{6}{rs22^3} \cdot SA2tio \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi223(rs22) + \left(\frac{15}{rs22^6} \cdot SB2tio \cdot ac^4 - \frac{18}{rs22^4} \cdot SA2tio \cdot ac^2 \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{3 \cdot pt2l}{rs22^2} \right) \cdot d2\varphi223(rs22) + \left(-\frac{15}{rs22^7} \cdot SB2tio \cdot ac^4 + \frac{18}{rs22^5} \cdot SA2tio \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot pt2l}{rs22^3} \right) \cdot d1\varphi223(rs22) \right) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > \gamma_{ti3} := \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs23^4} \cdot d4\varphi221(rs23) \cdot SB3tistr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs23^5} \cdot SB3tistr \cdot ac^4 \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{6}{rs23^3} \cdot SA3tistr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi221(rs23) + \left(\frac{15}{rs23^6} \cdot SB3tistr \cdot ac^4 \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{18}{rs23^4} \cdot SA3tistr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mti3}{rs23^2} \right) \cdot d2\varphi221(rs23) + \left(-\frac{15}{rs23^7} \cdot SB3tistr \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot ac^4 + \frac{18}{rs23^5} \cdot SA3tistr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mti3}{rs23^3} \right) \cdot d1\varphi221(rs23) \right) + \frac{1}{48} \\ & \cdot \left(\frac{1}{rs23^4} \cdot d4\varphi222(rs23) \cdot SB3titi \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs23^5} \cdot SB3titi \cdot ac^4 + \frac{6}{rs23^3} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot SA3titi \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi222(rs23) + \left(\frac{15}{rs23^6} \cdot SB3titi \cdot ac^4 - \frac{18}{rs23^4} \cdot SA3titi \right. \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lti3}{rs23^2} \Big) \cdot d2\varphi222(rs23) + \left(-\frac{15}{rs23^7} \cdot SB3titi \cdot ac^4 + \frac{18}{rs23^5} \right. \\
& \cdot SA3titi \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot lti3}{rs23^3} \Big) \cdot d1\varphi222(rs23) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs23^4} \right. \\
& \cdot d4\varphi223(rs23) \cdot SB3tio \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs23^5} \cdot SB3tio \cdot ac^4 + \frac{6}{rs23^3} \cdot SA3tio \right. \\
& \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi223(rs23) + \left(\frac{15}{rs23^6} \cdot SB3tio \cdot ac^4 - \frac{18}{rs23^4} \cdot SA3tio \cdot ac^2 \right. \\
& + \frac{3 \cdot pti3}{rs23^2} \Big) \cdot d2\varphi223(rs23) + \left(-\frac{15}{rs23^7} \cdot SB3tio \cdot ac^4 + \frac{18}{rs23^5} \cdot SA3tio \right. \\
& \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot pti3}{rs23^3} \Big) \cdot d1\varphi223(rs23) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma ti4 := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs24^4} \cdot d4\varphi221(rs24) \cdot SB4tisir \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs24^5} \cdot SB4tisir \cdot ac^4 \right. \right. \\
& + \frac{6}{rs24^3} \cdot SA4tisir \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi221(rs24) + \left(\frac{15}{rs24^6} \cdot SB4tisir \cdot ac^4 \right. \\
& - \frac{18}{rs24^4} \cdot SA4tisir \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mti4}{rs24^2} \Big) \cdot d2\varphi221(rs24) + \left(-\frac{15}{rs24^7} \cdot SB4tisir \right. \\
& \cdot ac^4 + \frac{18}{rs24^5} \cdot SA4tisir \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mti4}{rs24^3} \Big) \cdot d1\varphi221(rs24) \Big) + \frac{1}{48} \\
& \cdot \left(\frac{1}{rs24^4} \cdot d4\varphi222(rs24) \cdot SB4titi \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs24^5} \cdot SB4titi \cdot ac^4 + \frac{6}{rs24^3} \right. \right. \\
& \cdot SA4titi \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi222(rs24) + \left(\frac{15}{rs24^6} \cdot SB4titi \cdot ac^4 - \frac{18}{rs24^4} \cdot SA4titi \right. \\
& \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lti4}{rs24^2} \Big) \cdot d2\varphi222(rs24) + \left(-\frac{15}{rs24^7} \cdot SB4titi \cdot ac^4 + \frac{18}{rs24^5} \right. \\
& \cdot SA4titi \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot lti4}{rs24^3} \Big) \cdot d1\varphi222(rs24) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs24^4} \right. \\
& \cdot d4\varphi223(rs24) \cdot SB4tio \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs24^5} \cdot SB4tio \cdot ac^4 + \frac{6}{rs24^3} \cdot SA4tio \right. \\
& \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi223(rs24) + \left(\frac{15}{rs24^6} \cdot SB4tio \cdot ac^4 - \frac{18}{rs24^4} \cdot SA4tio \cdot ac^2 \right. \\
& + \frac{3 \cdot pti4}{rs24^2} \Big) \cdot d2\varphi223(rs24) + \left(-\frac{15}{rs24^7} \cdot SB4tio \cdot ac^4 + \frac{18}{rs24^5} \cdot SA4tio \right. \\
& \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot pti4}{rs24^3} \Big) \cdot d1\varphi223(rs24) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma ti5 := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs25^4} \cdot d4\varphi221(rs25) \cdot SB5tisir \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs25^5} \cdot SB5tisir \cdot ac^4 \right. \right. \\
& + \frac{6}{rs25^3} \cdot SA5tisir \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi221(rs25) + \left(\frac{15}{rs25^6} \cdot SB5tisir \cdot ac^4 \right. \\
& - \frac{18}{rs25^4} \cdot SA5tisir \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mti5}{rs25^2} \Big) \cdot d2\varphi221(rs25) + \left(-\frac{15}{rs25^7} \cdot SB5tisir \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot ac^4 + \frac{18}{rs25^5} \cdot SA5tistr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mti5}{rs25^3} \Big) \cdot d1\varphi221(rs25) \Big) + \frac{1}{48} \\
& \cdot \left(\frac{1}{rs25^4} \cdot d4\varphi222(rs25) \cdot SB5titi \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs25^5} \cdot SB5titi \cdot ac^4 + \frac{6}{rs25^3} \right. \right. \\
& \cdot SA5titi \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi222(rs25) + \left(\frac{15}{rs25^6} \cdot SB5titi \cdot ac^4 - \frac{18}{rs25^4} \cdot SA5titi \right. \\
& \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lti5}{rs25^2} \Big) \cdot d2\varphi222(rs25) + \left(-\frac{15}{rs25^7} \cdot SB5titi \cdot ac^4 + \frac{18}{rs25^5} \right. \\
& \cdot SA5titi \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot lti5}{rs25^3} \Big) \cdot d1\varphi222(rs25) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs25^4} \right. \\
& \cdot d4\varphi223(rs25) \cdot SB5tio \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs25^5} \cdot SB5tio \cdot ac^4 + \frac{6}{rs25^3} \cdot SA5tio \right. \\
& \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi223(rs25) + \left(\frac{15}{rs25^6} \cdot SB5tio \cdot ac^4 - \frac{18}{rs25^4} \cdot SA5tio \cdot ac^2 \right. \\
& + \frac{3 \cdot pti5}{rs25^2} \Big) \cdot d2\varphi223(rs25) + \left(-\frac{15}{rs25^7} \cdot SB5tio \cdot ac^4 + \frac{18}{rs25^5} \cdot SA5tio \right. \\
& \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot pti5}{rs25^3} \Big) \cdot d1\varphi223(rs25) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{ti6} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs26^4} \cdot d4\varphi221(rs26) \cdot SB6tistr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs26^5} \cdot SB6tistr \cdot ac^4 \right. \right. \\
& + \frac{6}{rs26^3} \cdot SA6tistr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi221(rs26) + \left(\frac{15}{rs26^6} \cdot SB6tistr \cdot ac^4 \right. \\
& - \frac{18}{rs26^4} \cdot SA6tistr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mti6}{rs26^2} \Big) \cdot d2\varphi221(rs26) + \left(-\frac{15}{rs26^7} \cdot SB6tistr \right. \\
& \cdot ac^4 + \frac{18}{rs26^5} \cdot SA6tistr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mti6}{rs26^3} \Big) \cdot d1\varphi221(rs26) \Big) + \frac{1}{48} \\
& \cdot \left(\frac{1}{rs26^4} \cdot d4\varphi222(rs26) \cdot SB6titi \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs26^5} \cdot SB6titi \cdot ac^4 + \frac{6}{rs26^3} \right. \right. \\
& \cdot SA6titi \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi222(rs26) + \left(\frac{15}{rs26^6} \cdot SB6titi \cdot ac^4 - \frac{18}{rs26^4} \cdot SA6titi \right. \\
& \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lti6}{rs26^2} \Big) \cdot d2\varphi222(rs26) + \left(-\frac{15}{rs26^7} \cdot SB6titi \cdot ac^4 + \frac{18}{rs26^5} \right. \\
& \cdot SA6titi \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot lti6}{rs26^3} \Big) \cdot d1\varphi222(rs26) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs26^4} \right. \\
& \cdot d4\varphi223(rs26) \cdot SB6tio \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs26^5} \cdot SB6tio \cdot ac^4 + \frac{6}{rs26^3} \cdot SA6tio \right. \\
& \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi223(rs26) + \left(\frac{15}{rs26^6} \cdot SB6tio \cdot ac^4 - \frac{18}{rs26^4} \cdot SA6tio \cdot ac^2 \right. \\
& + \frac{3 \cdot pti6}{rs26^2} \Big) \cdot d2\varphi223(rs26) + \left(-\frac{15}{rs26^7} \cdot SB6tio \cdot ac^4 + \frac{18}{rs26^5} \cdot SA6tio \right. \\
& \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot pti6}{rs26^3} \Big) \cdot d1\varphi223(rs26) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{ti7} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs27^4} \cdot d4\varphi221(rs27) \cdot SB7tistr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs27^5} \cdot SB7tistr \cdot ac^4 \right. \right. \\
& + \left. \left. \frac{6}{rs27^3} \cdot SA7tistr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi221(rs27) + \left(\frac{15}{rs27^6} \cdot SB7tistr \cdot ac^4 \right. \right. \\
& - \left. \left. \frac{18}{rs27^4} \cdot SA7tistr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mti7}{rs27^2} \right) \cdot d2\varphi221(rs27) + \left(-\frac{15}{rs27^7} \cdot SB7tistr \right. \right. \\
& \cdot ac^4 + \left. \frac{18}{rs27^5} \cdot SA7tistr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mti7}{rs27^3} \right) \cdot d1\varphi221(rs27) \Big) + \frac{1}{48} \\
& \cdot \left(\frac{1}{rs27^4} \cdot d4\varphi222(rs27) \cdot SB7titi \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs27^5} \cdot SB7titi \cdot ac^4 + \frac{6}{rs27^3} \right. \right. \\
& \cdot SA7titi \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi222(rs27) + \left(\frac{15}{rs27^6} \cdot SB7titi \cdot ac^4 - \frac{18}{rs27^4} \cdot SA7titi \right. \\
& \cdot ac^2 + \left. \frac{3 \cdot lti7}{rs27^2} \right) \cdot d2\varphi222(rs27) + \left(-\frac{15}{rs27^7} \cdot SB7titi \cdot ac^4 + \frac{18}{rs27^5} \right. \\
& \cdot SA7titi \cdot ac^2 - \left. \frac{3 \cdot lti7}{rs27^3} \right) \cdot d1\varphi222(rs27) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs27^4} \right. \\
& \cdot d4\varphi223(rs27) \cdot SB7tio \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs27^5} \cdot SB7tio \cdot ac^4 + \frac{6}{rs27^3} \cdot SA7tio \right. \\
& \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi223(rs27) + \left(\frac{15}{rs27^6} \cdot SB7tio \cdot ac^4 - \frac{18}{rs27^4} \cdot SA7tio \cdot ac^2 \right. \\
& + \left. \frac{3 \cdot pti7}{rs27^2} \right) \cdot d2\varphi223(rs27) + \left(-\frac{15}{rs27^7} \cdot SB7tio \cdot ac^4 + \frac{18}{rs27^5} \cdot SA7tio \right. \\
& \cdot ac^2 - \left. \frac{3 \cdot pti7}{rs27^3} \right) \cdot d1\varphi223(rs27) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{ti8} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs28^4} \cdot d4\varphi221(rs28) \cdot SB8tistr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs28^5} \cdot SB8tistr \cdot ac^4 \right. \right. \\
& + \left. \left. \frac{6}{rs28^3} \cdot SA8tistr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi221(rs28) + \left(\frac{15}{rs28^6} \cdot SB8tistr \cdot ac^4 \right. \right. \\
& - \left. \left. \frac{18}{rs28^4} \cdot SA8tistr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mti8}{rs28^2} \right) \cdot d2\varphi221(rs28) + \left(-\frac{15}{rs28^7} \cdot SB8tistr \right. \right. \\
& \cdot ac^4 + \left. \frac{18}{rs28^5} \cdot SA8tistr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mti8}{rs28^3} \right) \cdot d1\varphi221(rs28) \Big) + \frac{1}{48} \\
& \cdot \left(\frac{1}{rs28^4} \cdot d4\varphi222(rs28) \cdot SB8titi \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs28^5} \cdot SB8titi \cdot ac^4 + \frac{6}{rs28^3} \right. \right. \\
& \cdot SA8titi \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi222(rs28) + \left(\frac{15}{rs28^6} \cdot SB8titi \cdot ac^4 - \frac{18}{rs28^4} \cdot SA8titi \right. \\
& \cdot ac^2 + \left. \frac{3 \cdot lti8}{rs28^2} \right) \cdot d2\varphi222(rs28) + \left(-\frac{15}{rs28^7} \cdot SB8titi \cdot ac^4 + \frac{18}{rs28^5} \right. \\
& \cdot SA8titi \cdot ac^2 - \left. \frac{3 \cdot lti8}{rs28^3} \right) \cdot d1\varphi222(rs28) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs28^4} \right. \\
& \cdot d4\varphi223(rs28) \cdot SB8tio \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs28^5} \cdot SB8tio \cdot ac^4 + \frac{6}{rs28^3} \cdot SA8tio \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \cdot ac^2) \cdot d3\varphi223(rs28) + \left(\frac{15}{rs28^6} \cdot SB8tio \cdot ac^4 - \frac{18}{rs28^4} \cdot SA8tio \cdot ac^2 \right. \\ & \left. + \frac{3 \cdot pti8}{rs28^2} \right) \cdot d2\varphi223(rs28) + \left(-\frac{15}{rs28^7} \cdot SB8tio \cdot ac^4 + \frac{18}{rs28^5} \cdot SA8tio \right. \\ & \left. \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot pti8}{rs28^3} \right) \cdot d1\varphi223(rs28) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > \gamma_{ti9} := \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs29^4} \cdot d4\varphi221(rs29) \cdot SB9tistr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs29^5} \cdot SB9tistr \cdot ac^4 \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{6}{rs29^3} \cdot SA9tistr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi221(rs29) + \left(\frac{15}{rs29^6} \cdot SB9tistr \cdot ac^4 \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{18}{rs29^4} \cdot SA9tistr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mti9}{rs29^2} \right) \cdot d2\varphi221(rs29) + \left(-\frac{15}{rs29^7} \cdot SB9tistr \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot ac^4 + \frac{18}{rs29^5} \cdot SA9tistr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mti9}{rs29^3} \right) \cdot d1\varphi221(rs29) \right) + \frac{1}{48} \\ & \cdot \left(\frac{1}{rs29^4} \cdot d4\varphi222(rs29) \cdot SB9titi \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs29^5} \cdot SB9titi \cdot ac^4 + \frac{6}{rs29^3} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot SA9titi \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi222(rs29) + \left(\frac{15}{rs29^6} \cdot SB9titi \cdot ac^4 - \frac{18}{rs29^4} \cdot SA9titi \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lti9}{rs29^2} \right) \cdot d2\varphi222(rs29) + \left(-\frac{15}{rs29^7} \cdot SB9titi \cdot ac^4 + \frac{18}{rs29^5} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot SA9titi \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot lti9}{rs29^3} \right) \cdot d1\varphi222(rs29) \right) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs29^4} \right. \\ & \left. \cdot d4\varphi223(rs29) \cdot SB9tio \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs29^5} \cdot SB9tio \cdot ac^4 + \frac{6}{rs29^3} \cdot SA9tio \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi223(rs29) + \left(\frac{15}{rs29^6} \cdot SB9tio \cdot ac^4 - \frac{18}{rs29^4} \cdot SA9tio \cdot ac^2 \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{3 \cdot pti9}{rs29^2} \right) \cdot d2\varphi223(rs29) + \left(-\frac{15}{rs29^7} \cdot SB9tio \cdot ac^4 + \frac{18}{rs29^5} \cdot SA9tio \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot pti9}{rs29^3} \right) \cdot d1\varphi223(rs29) \right) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > \gamma_{ti10} := \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs210^4} \cdot d4\varphi221(rs210) \cdot SB10tistr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs210^5} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot SB10tistr \cdot ac^4 + \frac{6}{rs210^3} \cdot SA10tistr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi221(rs210) + \left(\frac{15}{rs210^6} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot SB10tistr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs210^4} \cdot SA10tistr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mti10}{rs210^2} \right) \cdot d2\varphi221(rs210) \right. \\ & \left. + \left(-\frac{15}{rs210^7} \cdot SB10tistr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs210^5} \cdot SA10tistr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mti10}{rs210^3} \right) \right. \\ & \left. \cdot d1\varphi221(rs210) \right) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs210^4} \cdot d4\varphi222(rs210) \cdot SB10titi \cdot ac^4 + \left(\right. \right. \\ & \left. \left. -\frac{6}{rs210^5} \cdot SB10titi \cdot ac^4 + \frac{6}{rs210^3} \cdot SA10titi \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi222(rs210) \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left(\frac{15}{rs210^6} \cdot SB10titi \cdot ac^4 - \frac{18}{rs210^4} \cdot SA10titi \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lti10}{rs210^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi222(rs210) + \left(-\frac{15}{rs210^7} \cdot SB10titi \cdot ac^4 + \frac{18}{rs210^5} \cdot SA10titi \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{3 \cdot lti10}{rs210^3} \right) \cdot d1\varphi222(rs210) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs210^4} \cdot d4\varphi223(rs210) \right. \\
& \cdot SB10tio \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs210^5} \cdot SB10tio \cdot ac^4 + \frac{6}{rs210^3} \cdot SA10tio \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi223(rs210) + \left(\frac{15}{rs210^6} \cdot SB10tio \cdot ac^4 - \frac{18}{rs210^4} \cdot SA10tio \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{3 \cdot pti10}{rs210^2} \right) \cdot d2\varphi223(rs210) + \left(-\frac{15}{rs210^7} \cdot SB10tio \cdot ac^4 + \frac{18}{rs210^5} \right. \\
& \left. \cdot SA10tio \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot pti10}{rs210^3} \right) \cdot d1\varphi223(rs210) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{ti11} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs211^4} \cdot d4\varphi221(rs211) \cdot SB11tisir \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs211^5} \right. \right. \\
& \cdot SB11tisir \cdot ac^4 + \frac{6}{rs211^3} \cdot SA11tisir \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi221(rs211) + \left(\frac{15}{rs211^6} \right. \\
& \cdot SB11tisir \cdot ac^4 - \frac{18}{rs211^4} \cdot SA11tisir \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mti11}{rs211^2} \Big) \cdot d2\varphi221(rs211) \\
& + \left(-\frac{15}{rs211^7} \cdot SB11tisir \cdot ac^4 + \frac{18}{rs211^5} \cdot SA11tisir \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mti11}{rs211^3} \right) \\
& \cdot d1\varphi221(rs211) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs211^4} \cdot d4\varphi222(rs211) \cdot SB11titi \cdot ac^4 + \left(\right. \right. \\
& \left. -\frac{6}{rs211^5} \cdot SB11titi \cdot ac^4 + \frac{6}{rs211^3} \cdot SA11titi \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi222(rs211) \right. \\
& + \left(\frac{15}{rs211^6} \cdot SB11titi \cdot ac^4 - \frac{18}{rs211^4} \cdot SA11titi \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lti11}{rs211^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi222(rs211) + \left(-\frac{15}{rs211^7} \cdot SB11titi \cdot ac^4 + \frac{18}{rs211^5} \cdot SA11titi \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{3 \cdot lti11}{rs211^3} \right) \cdot d1\varphi222(rs211) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs211^4} \cdot d4\varphi223(rs211) \right. \\
& \cdot SB11tio \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs211^5} \cdot SB11tio \cdot ac^4 + \frac{6}{rs211^3} \cdot SA11tio \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi223(rs211) + \left(\frac{15}{rs211^6} \cdot SB11tio \cdot ac^4 - \frac{18}{rs211^4} \cdot SA11tio \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{3 \cdot pti11}{rs211^2} \right) \cdot d2\varphi223(rs211) + \left(-\frac{15}{rs211^7} \cdot SB11tio \cdot ac^4 + \frac{18}{rs211^5} \right. \\
& \left. \cdot SA11tio \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot pti11}{rs211^3} \right) \cdot d1\varphi223(rs211) \Big) :
\end{aligned}$$

$$> \gamma_{ti12} := \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs212^4} \cdot d4\varphi221(rs212) \cdot SB12tisir \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs212^5} \right. \right.$$

$$\begin{aligned}
& \cdot SB12tistr \cdot ac^4 + \frac{6}{rs212^3} \cdot SA12tistr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi221(rs212) + \left(\frac{15}{rs212^6} \right. \\
& \cdot SB12tistr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs212^4} \cdot SA12tistr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mti12}{rs212^2} \Big) \cdot d2\varphi221(rs212) \\
& + \left(-\frac{15}{rs212^7} \cdot SB12tistr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs212^5} \cdot SA12tistr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mti12}{rs212^3} \right) \\
& \cdot d1\varphi221(rs212) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs212^4} \cdot d4\varphi222(rs212) \cdot SB12titi \cdot ac^4 + \left(\right. \right. \\
& - \frac{6}{rs212^5} \cdot SB12titi \cdot ac^4 + \frac{6}{rs212^3} \cdot SA12titi \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi222(rs212) \\
& + \left(\frac{15}{rs212^6} \cdot SB12titi \cdot ac^4 - \frac{18}{rs212^4} \cdot SA12titi \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lti12}{rs212^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi222(rs212) + \left(-\frac{15}{rs212^7} \cdot SB12titi \cdot ac^4 + \frac{18}{rs212^5} \cdot SA12titi \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{3 \cdot lti12}{rs212^3} \right) \cdot d1\varphi222(rs212) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs212^4} \cdot d4\varphi223(rs212) \right. \\
& \cdot SB12tio \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs212^5} \cdot SB12tio \cdot ac^4 + \frac{6}{rs212^3} \cdot SA12tio \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi223(rs212) + \left(\frac{15}{rs212^6} \cdot SB12tio \cdot ac^4 - \frac{18}{rs212^4} \cdot SA12tio \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{3 \cdot pti12}{rs212^2} \right) \cdot d2\varphi223(rs212) + \left(-\frac{15}{rs212^7} \cdot SB12tio \cdot ac^4 + \frac{18}{rs212^5} \right. \\
& \left. \cdot SA12tio \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot pti12}{rs212^3} \right) \cdot d1\varphi223(rs212) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{ti13} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs213^4} \cdot d4\varphi221(rs213) \cdot SB13tistr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs213^5} \right. \right. \\
& \cdot SB13tistr \cdot ac^4 + \frac{6}{rs213^3} \cdot SA13tistr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi221(rs213) + \left(\frac{15}{rs213^6} \right. \\
& \cdot SB13tistr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs213^4} \cdot SA13tistr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mti13}{rs213^2} \Big) \cdot d2\varphi221(rs213) \\
& + \left(-\frac{15}{rs213^7} \cdot SB13tistr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs213^5} \cdot SA13tistr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mti13}{rs213^3} \right) \\
& \cdot d1\varphi221(rs213) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs213^4} \cdot d4\varphi222(rs213) \cdot SB13titi \cdot ac^4 + \left(\right. \right. \\
& - \frac{6}{rs213^5} \cdot SB13titi \cdot ac^4 + \frac{6}{rs213^3} \cdot SA13titi \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi222(rs213) \\
& + \left(\frac{15}{rs213^6} \cdot SB13titi \cdot ac^4 - \frac{18}{rs213^4} \cdot SA13titi \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lti13}{rs213^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi222(rs213) + \left(-\frac{15}{rs213^7} \cdot SB13titi \cdot ac^4 + \frac{18}{rs213^5} \cdot SA13titi \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{3 \cdot lti13}{rs213^3} \right) \cdot d1\varphi222(rs213) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs213^4} \cdot d4\varphi223(rs213) \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \cdot SB13tio \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs213^5} \cdot SB13tio \cdot ac^4 + \frac{6}{rs213^3} \cdot SA13tio \cdot ac^2 \right) \\ & \cdot d3\varphi223(rs213) + \left(\frac{15}{rs213^6} \cdot SB13tio \cdot ac^4 - \frac{18}{rs213^4} \cdot SA13tio \cdot ac^2 \right. \\ & \left. + \frac{3 \cdot pti13}{rs213^2} \right) \cdot d2\varphi223(rs213) + \left(-\frac{15}{rs213^7} \cdot SB13tio \cdot ac^4 + \frac{18}{rs213^5} \right. \\ & \left. \cdot SA13tio \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot pti13}{rs213^3} \right) \cdot d1\varphi223(rs213) \Big): \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > \gamma_{ti14} := \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs214^4} \cdot d4\varphi221(rs214) \cdot SB14tistr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs214^5} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot SB14tistr \cdot ac^4 + \frac{6}{rs214^3} \cdot SA14tistr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi221(rs214) + \left(\frac{15}{rs214^6} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot SB14tistr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs214^4} \cdot SA14tistr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mti14}{rs214^2} \right) \cdot d2\varphi221(rs214) \right. \\ & \left. + \left(-\frac{15}{rs214^7} \cdot SB14tistr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs214^5} \cdot SA14tistr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mti14}{rs214^3} \right) \right. \\ & \left. \cdot d1\varphi221(rs214) \right) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs214^4} \cdot d4\varphi222(rs214) \cdot SB14titi \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs214^5} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot SB14titi \cdot ac^4 + \frac{6}{rs214^3} \cdot SA14titi \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi222(rs214) \right. \\ & \left. + \left(\frac{15}{rs214^6} \cdot SB14titi \cdot ac^4 - \frac{18}{rs214^4} \cdot SA14titi \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lti14}{rs214^2} \right) \right. \\ & \left. \cdot d2\varphi222(rs214) + \left(-\frac{15}{rs214^7} \cdot SB14titi \cdot ac^4 + \frac{18}{rs214^5} \cdot SA14titi \cdot ac^2 \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{3 \cdot lti14}{rs214^3} \right) \cdot d1\varphi222(rs214) \right) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs214^4} \cdot d4\varphi223(rs214) \right. \\ & \left. \cdot SB14tio \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs214^5} \cdot SB14tio \cdot ac^4 + \frac{6}{rs214^3} \cdot SA14tio \cdot ac^2 \right) \right. \\ & \left. \cdot d3\varphi223(rs214) + \left(\frac{15}{rs214^6} \cdot SB14tio \cdot ac^4 - \frac{18}{rs214^4} \cdot SA14tio \cdot ac^2 \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{3 \cdot pti14}{rs214^2} \right) \cdot d2\varphi223(rs214) + \left(-\frac{15}{rs214^7} \cdot SB14tio \cdot ac^4 + \frac{18}{rs214^5} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot SA14tio \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot pti14}{rs214^3} \right) \cdot d1\varphi223(rs214) \right) \Big): \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > \gamma_{ti15} := \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs215^4} \cdot d4\varphi221(rs215) \cdot SB15tistr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs215^5} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot SB15tistr \cdot ac^4 + \frac{6}{rs215^3} \cdot SA15tistr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi221(rs215) + \left(\frac{15}{rs215^6} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot SB15tistr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs215^4} \cdot SA15tistr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mti15}{rs215^2} \right) \cdot d2\varphi221(rs215) \right. \\ & \left. + \left(-\frac{15}{rs215^7} \cdot SB15tistr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs215^5} \cdot SA15tistr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mti15}{rs215^3} \right) \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot d1\varphi221(rs215) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs215^4} \cdot d4\varphi222(rs215) \cdot SB15titi \cdot ac^4 + \left(\right. \right. \\
& - \frac{6}{rs215^5} \cdot SB15titi \cdot ac^4 + \frac{6}{rs215^3} \cdot SA15titi \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi222(rs215) \\
& + \left(\frac{15}{rs215^6} \cdot SB15titi \cdot ac^4 - \frac{18}{rs215^4} \cdot SA15titi \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lti15}{rs215^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi222(rs215) + \left(- \frac{15}{rs215^7} \cdot SB15titi \cdot ac^4 + \frac{18}{rs215^5} \cdot SA15titi \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{3 \cdot lti15}{rs215^3} \right) \cdot d1\varphi222(rs215) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs215^4} \cdot d4\varphi223(rs215) \right. \\
& \cdot SB15tio \cdot ac^4 + \left(- \frac{6}{rs215^5} \cdot SB15tio \cdot ac^4 + \frac{6}{rs215^3} \cdot SA15tio \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi223(rs215) + \left(\frac{15}{rs215^6} \cdot SB15tio \cdot ac^4 - \frac{18}{rs215^4} \cdot SA15tio \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{3 \cdot pti15}{rs215^2} \right) \cdot d2\varphi223(rs215) + \left(- \frac{15}{rs215^7} \cdot SB15tio \cdot ac^4 + \frac{18}{rs215^5} \right. \\
& \left. \cdot SA15tio \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot pti15}{rs215^3} \right) \cdot d1\varphi223(rs215) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{ti16} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs216^4} \cdot d4\varphi221(rs216) \cdot SB16tistr \cdot ac^4 + \left(- \frac{6}{rs216^5} \right. \right. \\
& \cdot SB16tistr \cdot ac^4 + \frac{6}{rs216^3} \cdot SA16tistr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi221(rs216) + \left(\frac{15}{rs216^6} \right. \\
& \cdot SB16tistr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs216^4} \cdot SA16tistr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mti16}{rs216^2} \Big) \cdot d2\varphi221(rs216) \\
& + \left(- \frac{15}{rs216^7} \cdot SB16tistr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs216^5} \cdot SA16tistr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mti16}{rs216^3} \right) \\
& \cdot d1\varphi221(rs216) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs216^4} \cdot d4\varphi222(rs216) \cdot SB16titi \cdot ac^4 + \left(\right. \right. \\
& - \frac{6}{rs216^5} \cdot SB16titi \cdot ac^4 + \frac{6}{rs216^3} \cdot SA16titi \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi222(rs216) \\
& + \left(\frac{15}{rs216^6} \cdot SB16titi \cdot ac^4 - \frac{18}{rs216^4} \cdot SA16titi \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lti16}{rs216^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi222(rs216) + \left(- \frac{15}{rs216^7} \cdot SB16titi \cdot ac^4 + \frac{18}{rs216^5} \cdot SA16titi \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{3 \cdot lti16}{rs216^3} \right) \cdot d1\varphi222(rs216) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs216^4} \cdot d4\varphi223(rs216) \right. \\
& \cdot SB16tio \cdot ac^4 + \left(- \frac{6}{rs216^5} \cdot SB16tio \cdot ac^4 + \frac{6}{rs216^3} \cdot SA16tio \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi223(rs216) + \left(\frac{15}{rs216^6} \cdot SB16tio \cdot ac^4 - \frac{18}{rs216^4} \cdot SA16tio \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{3 \cdot pti16}{rs216^2} \right) \cdot d2\varphi223(rs216) + \left(- \frac{15}{rs216^7} \cdot SB16tio \cdot ac^4 + \frac{18}{rs216^5} \right.
\end{aligned}$$

$$\cdot SA16tio \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot ptl16}{rs216^3} \cdot d1\phi223(rs216) \Big) :$$

$$\begin{aligned} > \gamma_{ti} := \gamma_{ti1} + \gamma_{ti2} + \gamma_{ti3} + \gamma_{ti4} + \gamma_{ti5} + \gamma_{ti6} + \gamma_{ti7} + \gamma_{ti8} + \gamma_{ti9} \\ &+ \gamma_{ti10} + \gamma_{ti11} + \gamma_{ti12} + \gamma_{ti13} + \gamma_{ti14} + \gamma_{ti15} + \gamma_{ti16} : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > \gamma_{o1} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs31^4} \cdot d4\phi331(rs31) \cdot SB1osr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs31^5} \cdot SB1osr \cdot ac^4 \right. \right. \\ & + \left. \frac{6}{rs31^3} \cdot SA1osr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi331(rs31) + \left(\frac{15}{rs31^6} \cdot SB1osr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs31^4} \right. \\ & \cdot SA1osr \cdot ac^2 + \left. \frac{3 \cdot mol}{rs31^2} \right) \cdot d2\phi331(rs31) + \left(-\frac{15}{rs31^7} \cdot SB1osr \cdot ac^4 \right. \\ & + \left. \frac{18}{rs31^5} \cdot SA1osr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mol}{rs31^3} \right) \cdot d1\phi331(rs31) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs31^4} \right. \\ & \cdot d4\phi332(rs31) \cdot SB1oti \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs31^5} \cdot SB1oti \cdot ac^4 + \frac{6}{rs31^3} \cdot SA1oti \right. \\ & \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\phi332(rs31) + \left(\frac{15}{rs31^6} \cdot SB1oti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs31^4} \cdot SA1oti \cdot ac^2 \right. \\ & + \left. \frac{3 \cdot lo1}{rs31^2} \right) \cdot d2\phi332(rs31) + \left(-\frac{15}{rs31^7} \cdot SB1oti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs31^5} \cdot SA1oti \right. \\ & \cdot ac^2 - \left. \frac{3 \cdot lo1}{rs31^3} \right) \cdot d1\phi332(rs31) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs31^4} \cdot d4\phi333(rs31) \cdot SB1oo \right. \\ & \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs31^5} \cdot SB1oo \cdot ac^4 + \frac{6}{rs31^3} \cdot SA1oo \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi333(rs31) \\ & + \left(\frac{15}{rs31^6} \cdot SB1oo \cdot ac^4 - \frac{18}{rs31^4} \cdot SA1oo \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot pol}{rs31^2} \right) \cdot d2\phi333(rs31) \\ & + \left(-\frac{15}{rs31^7} \cdot SB1oo \cdot ac^4 + \frac{18}{rs31^5} \cdot SA1oo \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot pol}{rs31^3} \right) \\ & \cdot d1\phi333(rs31) \Big) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > \gamma_{o2} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs32^4} \cdot d4\phi331(rs32) \cdot SB2osr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs32^5} \cdot SB2osr \cdot ac^4 \right. \right. \\ & + \left. \frac{6}{rs32^3} \cdot SA2osr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi331(rs32) + \left(\frac{15}{rs32^6} \cdot SB2osr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs32^4} \right. \\ & \cdot SA2osr \cdot ac^2 + \left. \frac{3 \cdot mo2}{rs32^2} \right) \cdot d2\phi331(rs32) + \left(-\frac{15}{rs32^7} \cdot SB2osr \cdot ac^4 \right. \\ & + \left. \frac{18}{rs32^5} \cdot SA2osr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mo2}{rs32^3} \right) \cdot d1\phi331(rs32) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs32^4} \right. \\ & \cdot d4\phi332(rs32) \cdot SB2oti \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs32^5} \cdot SB2oti \cdot ac^4 + \frac{6}{rs32^3} \cdot SA2oti \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot ac^2) \cdot d3\varphi332(rs32) + \left(\frac{15}{rs32^6} \cdot SB2oti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs32^4} \cdot SA2oti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{3 \cdot lo2}{rs32^2} \right) \cdot d2\varphi332(rs32) + \left(-\frac{15}{rs32^7} \cdot SB2oti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs32^5} \cdot SA2oti \right. \\
& \left. \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot lo2}{rs32^3} \right) \cdot d1\varphi332(rs32) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs32^4} \cdot d4\varphi333(rs32) \cdot SB2oo \right. \\
& \left. \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs32^5} \cdot SB2oo \cdot ac^4 + \frac{6}{rs32^3} \cdot SA2oo \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi333(rs32) \right. \\
& \left. + \left(\frac{15}{rs32^6} \cdot SB2oo \cdot ac^4 - \frac{18}{rs32^4} \cdot SA2oo \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot po2}{rs32^2} \right) \cdot d2\varphi333(rs32) \right. \\
& \left. + \left(-\frac{15}{rs32^7} \cdot SB2oo \cdot ac^4 + \frac{18}{rs32^5} \cdot SA2oo \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot po2}{rs32^3} \right) \right. \\
& \left. \cdot d1\varphi333(rs32) \right) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{lo3} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs33^4} \cdot d4\varphi331(rs33) \cdot SB3osr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs33^5} \cdot SB3osr \cdot ac^4 \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{6}{rs33^3} \cdot SA3osr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi331(rs33) + \left(\frac{15}{rs33^6} \cdot SB3osr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs33^4} \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot SA3osr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mo3}{rs33^2} \right) \cdot d2\varphi331(rs33) + \left(-\frac{15}{rs33^7} \cdot SB3osr \cdot ac^4 \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{18}{rs33^5} \cdot SA3osr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mo3}{rs33^3} \right) \cdot d1\varphi331(rs33) \right) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs33^4} \right. \\
& \left. \cdot d4\varphi332(rs33) \cdot SB3oti \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs33^5} \cdot SB3oti \cdot ac^4 + \frac{6}{rs33^3} \cdot SA3oti \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi332(rs33) + \left(\frac{15}{rs33^6} \cdot SB3oti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs33^4} \cdot SA3oti \cdot ac^2 \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{3 \cdot lo3}{rs33^2} \right) \cdot d2\varphi332(rs33) + \left(-\frac{15}{rs33^7} \cdot SB3oti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs33^5} \cdot SA3oti \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot lo3}{rs33^3} \right) \cdot d1\varphi332(rs33) \right) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs33^4} \cdot d4\varphi333(rs33) \cdot SB3oo \right. \\
& \left. \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs33^5} \cdot SB3oo \cdot ac^4 + \frac{6}{rs33^3} \cdot SA3oo \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi333(rs33) \right. \\
& \left. + \left(\frac{15}{rs33^6} \cdot SB3oo \cdot ac^4 - \frac{18}{rs33^4} \cdot SA3oo \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot po3}{rs33^2} \right) \cdot d2\varphi333(rs33) \right. \\
& \left. + \left(-\frac{15}{rs33^7} \cdot SB3oo \cdot ac^4 + \frac{18}{rs33^5} \cdot SA3oo \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot po3}{rs33^3} \right) \right. \\
& \left. \cdot d1\varphi333(rs33) \right) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{lo4} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs34^4} \cdot d4\varphi331(rs34) \cdot SB4osr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs34^5} \cdot SB4osr \cdot ac^4 \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{6}{rs34^3} \cdot SA4osr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi331(rs34) + \left(\frac{15}{rs34^6} \cdot SB4osr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs34^4} \right. \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot SA4osr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mo4}{rs34^2} \Big) \cdot d2\phi331(rs34) + \left(-\frac{15}{rs34^7} \cdot SB4osr \cdot ac^4 \right. \\
& \left. + \frac{18}{rs34^5} \cdot SA4osr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mo4}{rs34^3} \right) \cdot d1\phi331(rs34) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs34^4} \right. \\
& \cdot d4\phi332(rs34) \cdot SB4oti \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs34^5} \cdot SB4oti \cdot ac^4 + \frac{6}{rs34^3} \cdot SA4oti \right. \\
& \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\phi332(rs34) + \left(\frac{15}{rs34^6} \cdot SB4oti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs34^4} \cdot SA4oti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{3 \cdot lo4}{rs34^2} \right) \cdot d2\phi332(rs34) + \left(-\frac{15}{rs34^7} \cdot SB4oti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs34^5} \cdot SA4oti \right. \\
& \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot lo4}{rs34^3} \Big) \cdot d1\phi332(rs34) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs34^4} \cdot d4\phi333(rs34) \cdot SB4oo \right. \\
& \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs34^5} \cdot SB4oo \cdot ac^4 + \frac{6}{rs34^3} \cdot SA4oo \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi333(rs34) \\
& + \left(\frac{15}{rs34^6} \cdot SB4oo \cdot ac^4 - \frac{18}{rs34^4} \cdot SA4oo \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot po4}{rs34^2} \right) \cdot d2\phi333(rs34) \\
& + \left(-\frac{15}{rs34^7} \cdot SB4oo \cdot ac^4 + \frac{18}{rs34^5} \cdot SA4oo \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot po4}{rs34^3} \right) \\
& \cdot d1\phi333(rs34) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{o5} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs35^4} \cdot d4\phi331(rs35) \cdot SB5osr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs35^5} \cdot SB5osr \cdot ac^4 \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{6}{rs35^3} \cdot SA5osr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi331(rs35) + \left(\frac{15}{rs35^6} \cdot SB5osr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs35^4} \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot SA5osr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mo5}{rs35^2} \right) \cdot d2\phi331(rs35) + \left(-\frac{15}{rs35^7} \cdot SB5osr \cdot ac^4 \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{18}{rs35^5} \cdot SA5osr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mo5}{rs35^3} \right) \cdot d1\phi331(rs35) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs35^4} \right. \\
& \cdot d4\phi332(rs35) \cdot SB5oti \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs35^5} \cdot SB5oti \cdot ac^4 + \frac{6}{rs35^3} \cdot SA5oti \right. \\
& \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\phi332(rs35) + \left(\frac{15}{rs35^6} \cdot SB5oti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs35^4} \cdot SA5oti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{3 \cdot lo5}{rs35^2} \right) \cdot d2\phi332(rs35) + \left(-\frac{15}{rs35^7} \cdot SB5oti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs35^5} \cdot SA5oti \right. \\
& \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot lo5}{rs35^3} \Big) \cdot d1\phi332(rs35) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs35^4} \cdot d4\phi333(rs35) \cdot SB5oo \right. \\
& \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs35^5} \cdot SB5oo \cdot ac^4 + \frac{6}{rs35^3} \cdot SA5oo \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi333(rs35) \\
& + \left(\frac{15}{rs35^6} \cdot SB5oo \cdot ac^4 - \frac{18}{rs35^4} \cdot SA5oo \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot po5}{rs35^2} \right) \cdot d2\phi333(rs35) \\
& + \left(-\frac{15}{rs35^7} \cdot SB5oo \cdot ac^4 + \frac{18}{rs35^5} \cdot SA5oo \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot po5}{rs35^3} \right)
\end{aligned}$$

$$\cdot d1\phi333(rs35) \Big) :$$

$$\begin{aligned} > \gamma_{lo6} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs36^4} \cdot d4\phi331(rs36) \cdot SB6osr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs36^5} \cdot SB6osr \cdot ac^4 \right. \right. \\ & + \left. \frac{6}{rs36^3} \cdot SA6osr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi331(rs36) + \left(\frac{15}{rs36^6} \cdot SB6osr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs36^4} \right. \\ & \cdot SA6osr \cdot ac^2 + \left. \frac{3 \cdot mo6}{rs36^2} \right) \cdot d2\phi331(rs36) + \left(-\frac{15}{rs36^7} \cdot SB6osr \cdot ac^4 \right. \\ & + \left. \frac{18}{rs36^5} \cdot SA6osr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mo6}{rs36^3} \right) \cdot d1\phi331(rs36) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs36^4} \right. \\ & \cdot d4\phi332(rs36) \cdot SB6oti \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs36^5} \cdot SB6oti \cdot ac^4 + \frac{6}{rs36^3} \cdot SA6oti \right. \\ & \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\phi332(rs36) + \left(\frac{15}{rs36^6} \cdot SB6oti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs36^4} \cdot SA6oti \cdot ac^2 \right. \\ & + \left. \frac{3 \cdot lo6}{rs36^2} \right) \cdot d2\phi332(rs36) + \left(-\frac{15}{rs36^7} \cdot SB6oti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs36^5} \cdot SA6oti \right. \\ & \cdot ac^2 - \left. \frac{3 \cdot lo6}{rs36^3} \right) \cdot d1\phi332(rs36) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs36^4} \cdot d4\phi333(rs36) \cdot SB6oo \right. \\ & \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs36^5} \cdot SB6oo \cdot ac^4 + \frac{6}{rs36^3} \cdot SA6oo \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi333(rs36) \\ & + \left(\frac{15}{rs36^6} \cdot SB6oo \cdot ac^4 - \frac{18}{rs36^4} \cdot SA6oo \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot po6}{rs36^2} \right) \cdot d2\phi333(rs36) \\ & + \left(-\frac{15}{rs36^7} \cdot SB6oo \cdot ac^4 + \frac{18}{rs36^5} \cdot SA6oo \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot po6}{rs36^3} \right) \\ & \cdot d1\phi333(rs36) \Big) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > \gamma_{lo7} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs37^4} \cdot d4\phi331(rs37) \cdot SB7osr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs37^5} \cdot SB7osr \cdot ac^4 \right. \right. \\ & + \left. \frac{6}{rs37^3} \cdot SA7osr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi331(rs37) + \left(\frac{15}{rs37^6} \cdot SB7osr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs37^4} \right. \\ & \cdot SA7osr \cdot ac^2 + \left. \frac{3 \cdot mo7}{rs37^2} \right) \cdot d2\phi331(rs37) + \left(-\frac{15}{rs37^7} \cdot SB7osr \cdot ac^4 \right. \\ & + \left. \frac{18}{rs37^5} \cdot SA7osr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mo7}{rs37^3} \right) \cdot d1\phi331(rs37) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs37^4} \right. \\ & \cdot d4\phi332(rs37) \cdot SB7oti \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs37^5} \cdot SB7oti \cdot ac^4 + \frac{6}{rs37^3} \cdot SA7oti \right. \\ & \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\phi332(rs37) + \left(\frac{15}{rs37^6} \cdot SB7oti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs37^4} \cdot SA7oti \cdot ac^2 \right. \\ & + \left. \frac{3 \cdot lo7}{rs37^2} \right) \cdot d2\phi332(rs37) + \left(-\frac{15}{rs37^7} \cdot SB7oti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs37^5} \cdot SA7oti \right. \\ & \cdot ac^2 - \left. \frac{3 \cdot lo7}{rs37^3} \right) \cdot d1\phi332(rs37) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs37^4} \cdot d4\phi333(rs37) \cdot SB7oo \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs37^5} \cdot SB700 \cdot ac^4 + \frac{6}{rs37^3} \cdot SA700 \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi333(rs37) \\
& + \left(\frac{15}{rs37^6} \cdot SB700 \cdot ac^4 - \frac{18}{rs37^4} \cdot SA700 \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot po7}{rs37} \right) \cdot d2\phi333(rs37) \\
& + \left(-\frac{15}{rs37^7} \cdot SB700 \cdot ac^4 + \frac{18}{rs37^5} \cdot SA700 \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot po7}{rs37^3} \right) \\
& \cdot d1\phi333(rs37) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{lo8} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs38^4} \cdot d4\phi331(rs38) \cdot SB80sr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs38^5} \cdot SB80sr \cdot ac^4 \right. \right. \\
& + \left. \frac{6}{rs38^3} \cdot SA80sr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi331(rs38) + \left(\frac{15}{rs38^6} \cdot SB80sr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs38^4} \right. \\
& \cdot SA80sr \cdot ac^2 + \left. \frac{3 \cdot mo8}{rs38^2} \right) \cdot d2\phi331(rs38) + \left(-\frac{15}{rs38^7} \cdot SB80sr \cdot ac^4 \right. \\
& + \left. \frac{18}{rs38^5} \cdot SA80sr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mo8}{rs38^3} \right) \cdot d1\phi331(rs38) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs38^4} \right. \\
& \cdot d4\phi332(rs38) \cdot SB80ti \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs38^5} \cdot SB80ti \cdot ac^4 + \frac{6}{rs38^3} \cdot SA80ti \right. \\
& \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\phi332(rs38) + \left(\frac{15}{rs38^6} \cdot SB80ti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs38^4} \cdot SA80ti \cdot ac^2 \right. \\
& + \left. \frac{3 \cdot lo8}{rs38^2} \right) \cdot d2\phi332(rs38) + \left(-\frac{15}{rs38^7} \cdot SB80ti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs38^5} \cdot SA80ti \right. \\
& \cdot ac^2 - \left. \frac{3 \cdot lo8}{rs38^3} \right) \cdot d1\phi332(rs38) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs38^4} \cdot d4\phi333(rs38) \cdot SB80o \right. \\
& \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs38^5} \cdot SB80o \cdot ac^4 + \frac{6}{rs38^3} \cdot SA80o \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi333(rs38) \\
& + \left(\frac{15}{rs38^6} \cdot SB80o \cdot ac^4 - \frac{18}{rs38^4} \cdot SA80o \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot po8}{rs38^2} \right) \cdot d2\phi333(rs38) \\
& + \left(-\frac{15}{rs38^7} \cdot SB80o \cdot ac^4 + \frac{18}{rs38^5} \cdot SA80o \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot po8}{rs38^3} \right) \\
& \cdot d1\phi333(rs38) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{lo9} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs39^4} \cdot d4\phi331(rs39) \cdot SB90sr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs39^5} \cdot SB90sr \cdot ac^4 \right. \right. \\
& + \left. \frac{6}{rs39^3} \cdot SA90sr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi331(rs39) + \left(\frac{15}{rs39^6} \cdot SB90sr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs39^4} \right. \\
& \cdot SA90sr \cdot ac^2 + \left. \frac{3 \cdot mo9}{rs39^2} \right) \cdot d2\phi331(rs39) + \left(-\frac{15}{rs39^7} \cdot SB90sr \cdot ac^4 \right. \\
& + \left. \frac{18}{rs39^5} \cdot SA90sr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mo9}{rs39^3} \right) \cdot d1\phi331(rs39) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs39^4} \right. \\
& \cdot d4\phi332(rs39) \cdot SB90ti \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs39^5} \cdot SB90ti \cdot ac^4 + \frac{6}{rs39^3} \cdot SA90ti \right. \\
& \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\phi332(rs39) + \left(\frac{15}{rs39^6} \cdot SB90ti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs39^4} \cdot SA90ti \cdot ac^2 \right. \\
& + \left. \frac{3 \cdot lo9}{rs39^2} \right) \cdot d2\phi332(rs39) + \left(-\frac{15}{rs39^7} \cdot SB90ti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs39^5} \cdot SA90ti \cdot ac^2 \right. \\
& - \left. \frac{3 \cdot lo9}{rs39^3} \right) \cdot d1\phi332(rs39) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs39^4} \cdot d4\phi333(rs39) \cdot SB90o \right. \\
& \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs39^5} \cdot SB90o \cdot ac^4 + \frac{6}{rs39^3} \cdot SA90o \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi333(rs39) \\
& + \left(\frac{15}{rs39^6} \cdot SB90o \cdot ac^4 - \frac{18}{rs39^4} \cdot SA90o \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot po9}{rs39^2} \right) \cdot d2\phi333(rs39) \\
& + \left(-\frac{15}{rs39^7} \cdot SB90o \cdot ac^4 + \frac{18}{rs39^5} \cdot SA90o \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot po9}{rs39^3} \right) \\
& \cdot d1\phi333(rs39) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot ac^2) \cdot d3\varphi332(rs39) + \left(\frac{15}{rs39^6} \cdot SB9oti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs39^4} \cdot SA9oti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{3 \cdot lo9}{rs39^2} \right) \cdot d2\varphi332(rs39) + \left(-\frac{15}{rs39^7} \cdot SB9oti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs39^5} \cdot SA9oti \right. \\
& \left. \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot lo9}{rs39^3} \right) \cdot d1\varphi332(rs39) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs39^4} \cdot d4\varphi333(rs39) \cdot SB9oo \right. \\
& \left. \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs39^5} \cdot SB9oo \cdot ac^4 + \frac{6}{rs39^3} \cdot SA9oo \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi333(rs39) \right. \\
& \left. + \left(\frac{15}{rs39^6} \cdot SB9oo \cdot ac^4 - \frac{18}{rs39^4} \cdot SA9oo \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot po9}{rs39^2} \right) \cdot d2\varphi333(rs39) \right. \\
& \left. + \left(-\frac{15}{rs39^7} \cdot SB9oo \cdot ac^4 + \frac{18}{rs39^5} \cdot SA9oo \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot po9}{rs39^3} \right) \right. \\
& \left. \cdot d1\varphi333(rs39) \right) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{o10} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs310^4} \cdot d4\varphi331(rs310) \cdot SB10osr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs310^5} \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot SB10osr \cdot ac^4 + \frac{6}{rs310^3} \cdot SA10osr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi331(rs310) + \left(\frac{15}{rs310^6} \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot SB10osr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs310^4} \cdot SA10osr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mo10}{rs310^2} \right) \cdot d2\varphi331(rs310) \right. \\
& \left. + \left(-\frac{15}{rs310^7} \cdot SB10osr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs310^5} \cdot SA10osr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mo10}{rs310^3} \right) \right. \\
& \left. \cdot d1\varphi331(rs310) \right) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs310^4} \cdot d4\varphi332(rs310) \cdot SB10oti \cdot ac^4 + \left(\right. \right. \\
& \left. \left. -\frac{6}{rs310^5} \cdot SB10oti \cdot ac^4 + \frac{6}{rs310^3} \cdot SA10oti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi332(rs310) \right. \\
& \left. + \left(\frac{15}{rs310^6} \cdot SB10oti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs310^4} \cdot SA10oti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lo10}{rs310^2} \right) \right. \\
& \left. \cdot d2\varphi332(rs310) + \left(-\frac{15}{rs310^7} \cdot SB10oti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs310^5} \cdot SA10oti \cdot ac^2 \right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{3 \cdot lo10}{rs310^3} \right) \cdot d1\varphi332(rs310) \right) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs310^4} \cdot d4\varphi333(rs310) \right. \\
& \left. \cdot SB10oo \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs310^5} \cdot SB10oo \cdot ac^4 + \frac{6}{rs310^3} \cdot SA10oo \cdot ac^2 \right) \right. \\
& \left. \cdot d3\varphi333(rs310) + \left(\frac{15}{rs310^6} \cdot SB10oo \cdot ac^4 - \frac{18}{rs310^4} \cdot SA10oo \cdot ac^2 \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{3 \cdot po10}{rs310^2} \right) \cdot d2\varphi333(rs310) + \left(-\frac{15}{rs310^7} \cdot SB10oo \cdot ac^4 + \frac{18}{rs310^5} \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot SA10oo \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot po10}{rs310^3} \right) \cdot d1\varphi333(rs310) \right) :
\end{aligned}$$

$$> \gamma_{o11} := \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs311^4} \cdot d4\varphi331(rs311) \cdot SB11osr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs311^5} \right. \right.$$

$$\begin{aligned}
& \cdot SB11osr \cdot ac^4 + \frac{6}{rs311^3} \cdot SA11osr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi331(rs311) + \left(\frac{15}{rs311^6} \right. \\
& \cdot SB11osr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs311^4} \cdot SA11osr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mo11}{rs311^2} \Big) \cdot d2\varphi331(rs311) \\
& + \left(-\frac{15}{rs311^7} \cdot SB11osr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs311^5} \cdot SA11osr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mo11}{rs311^3} \right) \\
& \cdot d1\varphi331(rs311) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs311^4} \cdot d4\varphi332(rs311) \cdot SB11oti \cdot ac^4 + \left(\right. \right. \\
& - \frac{6}{rs311^5} \cdot SB11oti \cdot ac^4 + \frac{6}{rs311^3} \cdot SA11oti \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi332(rs311) \\
& + \left(\frac{15}{rs311^6} \cdot SB11oti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs311^4} \cdot SA11oti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lo11}{rs311^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi332(rs311) + \left(-\frac{15}{rs311^7} \cdot SB11oti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs311^5} \cdot SA11oti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{3 \cdot lo11}{rs311^3} \right) \cdot d1\varphi332(rs311) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs311^4} \cdot d4\varphi333(rs311) \right. \\
& \cdot SB11oo \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs311^5} \cdot SB11oo \cdot ac^4 + \frac{6}{rs311^3} \cdot SA11oo \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi333(rs311) + \left(\frac{15}{rs311^6} \cdot SB11oo \cdot ac^4 - \frac{18}{rs311^4} \cdot SA11oo \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{3 \cdot po11}{rs311^2} \right) \cdot d2\varphi333(rs311) + \left(-\frac{15}{rs311^7} \cdot SB11oo \cdot ac^4 + \frac{18}{rs311^5} \right. \\
& \left. \cdot SA11oo \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot po11}{rs311^3} \right) \cdot d1\varphi333(rs311) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{o12} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs312^4} \cdot d4\varphi331(rs312) \cdot SB12osr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs312^5} \right. \right. \\
& \cdot SB12osr \cdot ac^4 + \frac{6}{rs312^3} \cdot SA12osr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi331(rs312) + \left(\frac{15}{rs312^6} \right. \\
& \cdot SB12osr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs312^4} \cdot SA12osr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mo12}{rs312^2} \Big) \cdot d2\varphi331(rs312) \\
& + \left(-\frac{15}{rs312^7} \cdot SB12osr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs312^5} \cdot SA12osr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mo12}{rs312^3} \right) \\
& \cdot d1\varphi331(rs312) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs312^4} \cdot d4\varphi332(rs312) \cdot SB12oti \cdot ac^4 + \left(\right. \right. \\
& - \frac{6}{rs312^5} \cdot SB12oti \cdot ac^4 + \frac{6}{rs312^3} \cdot SA12oti \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi332(rs312) \\
& + \left(\frac{15}{rs312^6} \cdot SB12oti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs312^4} \cdot SA12oti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lo12}{rs312^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi332(rs312) + \left(-\frac{15}{rs312^7} \cdot SB12oti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs312^5} \cdot SA12oti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{3 \cdot lo12}{rs312^3} \right) \cdot d1\varphi332(rs312) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs312^4} \cdot d4\varphi333(rs312) \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \cdot SB1200 \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs312^5} \cdot SB1200 \cdot ac^4 + \frac{6}{rs312^3} \cdot SA1200 \cdot ac^2 \right) \\ & \cdot d3\phi333(rs312) + \left(\frac{15}{rs312^6} \cdot SB1200 \cdot ac^4 - \frac{18}{rs312^4} \cdot SA1200 \cdot ac^2 \right. \\ & \left. + \frac{3 \cdot po12}{rs312^2} \right) \cdot d2\phi333(rs312) + \left(-\frac{15}{rs312^7} \cdot SB1200 \cdot ac^4 + \frac{18}{rs312^5} \right. \\ & \left. \cdot SA1200 \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot po12}{rs312^3} \right) \cdot d1\phi333(rs312) \Big): \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > \gamma_{o13} := \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs313^4} \cdot d4\phi331(rs313) \cdot SB130sr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs313^5} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot SB130sr \cdot ac^4 + \frac{6}{rs313^3} \cdot SA130sr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi331(rs313) + \left(\frac{15}{rs313^6} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot SB130sr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs313^4} \cdot SA130sr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mo13}{rs313^2} \right) \cdot d2\phi331(rs313) \right. \\ & \left. + \left(-\frac{15}{rs313^7} \cdot SB130sr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs313^5} \cdot SA130sr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mo13}{rs313^3} \right) \right. \\ & \left. \cdot d1\phi331(rs313) \right) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs313^4} \cdot d4\phi332(rs313) \cdot SB130ti \cdot ac^4 + \left(\right. \right. \\ & \left. \left. -\frac{6}{rs313^5} \cdot SB130ti \cdot ac^4 + \frac{6}{rs313^3} \cdot SA130ti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi332(rs313) \right. \\ & \left. + \left(\frac{15}{rs313^6} \cdot SB130ti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs313^4} \cdot SA130ti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lo13}{rs313^2} \right) \right. \\ & \left. \cdot d2\phi332(rs313) + \left(-\frac{15}{rs313^7} \cdot SB130ti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs313^5} \cdot SA130ti \cdot ac^2 \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{3 \cdot lo13}{rs313^3} \right) \cdot d1\phi332(rs313) \right) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs313^4} \cdot d4\phi333(rs313) \right. \\ & \left. \cdot SB130o \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs313^5} \cdot SB130o \cdot ac^4 + \frac{6}{rs313^3} \cdot SA130o \cdot ac^2 \right) \right. \\ & \left. \cdot d3\phi333(rs313) + \left(\frac{15}{rs313^6} \cdot SB130o \cdot ac^4 - \frac{18}{rs313^4} \cdot SA130o \cdot ac^2 \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{3 \cdot po13}{rs313^2} \right) \cdot d2\phi333(rs313) + \left(-\frac{15}{rs313^7} \cdot SB130o \cdot ac^4 + \frac{18}{rs313^5} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot SA130o \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot po13}{rs313^3} \right) \cdot d1\phi333(rs313) \right) \Big): \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > \gamma_{o14} := \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs314^4} \cdot d4\phi331(rs314) \cdot SB140sr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs314^5} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot SB140sr \cdot ac^4 + \frac{6}{rs314^3} \cdot SA140sr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi331(rs314) + \left(\frac{15}{rs314^6} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot SB140sr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs314^4} \cdot SA140sr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mo14}{rs314^2} \right) \cdot d2\phi331(rs314) \right. \\ & \left. + \left(-\frac{15}{rs314^7} \cdot SB140sr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs314^5} \cdot SA140sr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mo14}{rs314^3} \right) \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot d1\varphi331(rs314) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs314^4} \cdot d4\varphi332(rs314) \cdot SB14oti \cdot ac^4 + \left(\right. \right. \\
& - \frac{6}{rs314^5} \cdot SB14oti \cdot ac^4 + \frac{6}{rs314^3} \cdot SA14oti \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi332(rs314) \\
& + \left(\frac{15}{rs314^6} \cdot SB14oti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs314^4} \cdot SA14oti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lo14}{rs314^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi332(rs314) + \left(- \frac{15}{rs314^7} \cdot SB14oti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs314^5} \cdot SA14oti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{3 \cdot lo14}{rs314^3} \right) \cdot d1\varphi332(rs314) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs314^4} \cdot d4\varphi333(rs314) \right. \\
& \cdot SB14oo \cdot ac^4 + \left(- \frac{6}{rs314^5} \cdot SB14oo \cdot ac^4 + \frac{6}{rs314^3} \cdot SA14oo \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi333(rs314) + \left(\frac{15}{rs314^6} \cdot SB14oo \cdot ac^4 - \frac{18}{rs314^4} \cdot SA14oo \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{3 \cdot po14}{rs314^2} \right) \cdot d2\varphi333(rs314) + \left(- \frac{15}{rs314^7} \cdot SB14oo \cdot ac^4 + \frac{18}{rs314^5} \right. \\
& \left. \cdot SA14oo \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot po14}{rs314^3} \right) \cdot d1\varphi333(rs314) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{o15} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs315^4} \cdot d4\varphi331(rs315) \cdot SB15osr \cdot ac^4 + \left(- \frac{6}{rs315^5} \right. \right. \\
& \cdot SB15osr \cdot ac^4 + \frac{6}{rs315^3} \cdot SA15osr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi331(rs315) + \left(\frac{15}{rs315^6} \right. \\
& \cdot SB15osr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs315^4} \cdot SA15osr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mo15}{rs315^2} \Big) \cdot d2\varphi331(rs315) \\
& + \left(- \frac{15}{rs315^7} \cdot SB15osr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs315^5} \cdot SA15osr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mo15}{rs315^3} \right) \\
& \cdot d1\varphi331(rs315) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs315^4} \cdot d4\varphi332(rs315) \cdot SB15oti \cdot ac^4 + \left(\right. \right. \\
& - \frac{6}{rs315^5} \cdot SB15oti \cdot ac^4 + \frac{6}{rs315^3} \cdot SA15oti \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi332(rs315) \\
& + \left(\frac{15}{rs315^6} \cdot SB15oti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs315^4} \cdot SA15oti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lo15}{rs315^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi332(rs315) + \left(- \frac{15}{rs315^7} \cdot SB15oti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs315^5} \cdot SA15oti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{3 \cdot lo15}{rs315^3} \right) \cdot d1\varphi332(rs315) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs315^4} \cdot d4\varphi333(rs315) \right. \\
& \cdot SB15oo \cdot ac^4 + \left(- \frac{6}{rs315^5} \cdot SB15oo \cdot ac^4 + \frac{6}{rs315^3} \cdot SA15oo \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi333(rs315) + \left(\frac{15}{rs315^6} \cdot SB15oo \cdot ac^4 - \frac{18}{rs315^4} \cdot SA15oo \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{3 \cdot po15}{rs315^2} \right) \cdot d2\varphi333(rs315) + \left(- \frac{15}{rs315^7} \cdot SB15oo \cdot ac^4 + \frac{18}{rs315^5} \right.
\end{aligned}$$

$$\cdot SA1500 \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot po15}{rs315^3} \cdot d1\phi333(rs315) \Big) :$$

$$\begin{aligned} > \gamma_{lo16} := \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs316^4} \cdot d4\phi331(rs316) \cdot SB16osr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs316^5} \right. \right. \\ & \cdot SB16osr \cdot ac^4 + \frac{6}{rs316^3} \cdot SA16osr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\phi331(rs316) + \left(\frac{15}{rs316^6} \right. \\ & \cdot SB16osr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs316^4} \cdot SA16osr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mo16}{rs316^2} \Big) \cdot d2\phi331(rs316) \\ & + \left(-\frac{15}{rs316^7} \cdot SB16osr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs316^5} \cdot SA16osr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mo16}{rs316^3} \right) \\ & \cdot d1\phi331(rs316) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs316^4} \cdot d4\phi332(rs316) \cdot SB16oti \cdot ac^4 + \left(\right. \right. \\ & - \frac{6}{rs316^5} \cdot SB16oti \cdot ac^4 + \frac{6}{rs316^3} \cdot SA16oti \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\phi332(rs316) \\ & + \left(\frac{15}{rs316^6} \cdot SB16oti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs316^4} \cdot SA16oti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lo16}{rs316^2} \right) \\ & \cdot d2\phi332(rs316) + \left(-\frac{15}{rs316^7} \cdot SB16oti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs316^5} \cdot SA16oti \cdot ac^2 \right. \\ & \left. - \frac{3 \cdot lo16}{rs316^3} \right) \cdot d1\phi332(rs316) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs316^4} \cdot d4\phi333(rs316) \right. \\ & \cdot SB16oo \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs316^5} \cdot SB16oo \cdot ac^4 + \frac{6}{rs316^3} \cdot SA16oo \cdot ac^2 \right) \\ & \cdot d3\phi333(rs316) + \left(\frac{15}{rs316^6} \cdot SB16oo \cdot ac^4 - \frac{18}{rs316^4} \cdot SA16oo \cdot ac^2 \right. \\ & \left. + \frac{3 \cdot po16}{rs316^2} \right) \cdot d2\phi333(rs316) + \left(-\frac{15}{rs316^7} \cdot SB16oo \cdot ac^4 + \frac{18}{rs316^5} \right. \\ & \left. \cdot SA16oo \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot po16}{rs316^3} \right) \cdot d1\phi333(rs316) \Big) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > \gamma_{lo17} := \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs317^4} \cdot d4\phi331(rs317) \cdot SB17osr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs317^5} \right. \right. \\ & \cdot SB17osr \cdot ac^4 + \frac{6}{rs317^3} \cdot SA17osr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\phi331(rs317) + \left(\frac{15}{rs317^6} \right. \\ & \cdot SB17osr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs317^4} \cdot SA17osr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mo17}{rs317^2} \Big) \cdot d2\phi331(rs317) \\ & + \left(-\frac{15}{rs317^7} \cdot SB17osr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs317^5} \cdot SA17osr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mo17}{rs317^3} \right) \\ & \cdot d1\phi331(rs317) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs317^4} \cdot d4\phi332(rs317) \cdot SB17oti \cdot ac^4 + \left(\right. \right. \\ & - \frac{6}{rs317^5} \cdot SB17oti \cdot ac^4 + \frac{6}{rs317^3} \cdot SA17oti \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\phi332(rs317) \\ & + \left(\frac{15}{rs317^6} \cdot SB17oti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs317^4} \cdot SA17oti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lo17}{rs317^2} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot d2\varphi332(rs317) + \left(-\frac{15}{rs317^7} \cdot SB17oti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs317^5} \cdot SA17oti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{3 \cdot lo17}{rs317^3} \right) \cdot d1\varphi332(rs317) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs317^4} \cdot d4\varphi333(rs317) \right. \\
& \cdot SB17oo \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs317^5} \cdot SB17oo \cdot ac^4 + \frac{6}{rs317^3} \cdot SA17oo \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi333(rs317) + \left(\frac{15}{rs317^6} \cdot SB17oo \cdot ac^4 - \frac{18}{rs317^4} \cdot SA17oo \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{3 \cdot po17}{rs317^2} \right) \cdot d2\varphi333(rs317) + \left(-\frac{15}{rs317^7} \cdot SB17oo \cdot ac^4 + \frac{18}{rs317^5} \right. \\
& \left. \cdot SA17oo \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot po17}{rs317^3} \right) \cdot d1\varphi333(rs317) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{o18} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs318^4} \cdot d4\varphi331(rs318) \cdot SB18osr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs318^5} \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot SB18osr \cdot ac^4 + \frac{6}{rs318^3} \cdot SA18osr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi331(rs318) + \left(\frac{15}{rs318^6} \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot SB18osr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs318^4} \cdot SA18osr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mo18}{rs318^2} \right) \cdot d2\varphi331(rs318) \right. \\
& \left. + \left(-\frac{15}{rs318^7} \cdot SB18osr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs318^5} \cdot SA18osr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mo18}{rs318^3} \right) \right. \\
& \left. \cdot d1\varphi331(rs318) \right) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs318^4} \cdot d4\varphi332(rs318) \cdot SB18oti \cdot ac^4 + \left(\right. \right. \\
& \left. \left. -\frac{6}{rs318^5} \cdot SB18oti \cdot ac^4 + \frac{6}{rs318^3} \cdot SA18oti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi332(rs318) \right. \\
& \left. + \left(\frac{15}{rs318^6} \cdot SB18oti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs318^4} \cdot SA18oti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lo18}{rs318^2} \right) \right. \\
& \left. \cdot d2\varphi332(rs318) + \left(-\frac{15}{rs318^7} \cdot SB18oti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs318^5} \cdot SA18oti \cdot ac^2 \right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{3 \cdot lo18}{rs318^3} \right) \cdot d1\varphi332(rs318) \right) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs318^4} \cdot d4\varphi333(rs318) \right. \\
& \cdot SB18oo \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs318^5} \cdot SB18oo \cdot ac^4 + \frac{6}{rs318^3} \cdot SA18oo \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi333(rs318) + \left(\frac{15}{rs318^6} \cdot SB18oo \cdot ac^4 - \frac{18}{rs318^4} \cdot SA18oo \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{3 \cdot po18}{rs318^2} \right) \cdot d2\varphi333(rs318) + \left(-\frac{15}{rs318^7} \cdot SB18oo \cdot ac^4 + \frac{18}{rs318^5} \right. \\
& \left. \cdot SA18oo \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot po18}{rs318^3} \right) \cdot d1\varphi333(rs318) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{o19} := & \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs319^4} \cdot d4\varphi331(rs319) \cdot SB19osr \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs319^5} \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot SB19osr \cdot ac^4 + \frac{6}{rs319^3} \cdot SA19osr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi331(rs319) + \left(\frac{15}{rs319^6} \right. \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot SB19osr \cdot ac^4 - \frac{18}{rs319^4} \cdot SA19osr \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot mo19}{rs319^2} \Big) \cdot d2\phi331(rs319) \\
& + \left(-\frac{15}{rs319^7} \cdot SB19osr \cdot ac^4 + \frac{18}{rs319^5} \cdot SA19osr \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot mo19}{rs319^3} \right) \\
& \cdot d1\phi331(rs319) \Big) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs319^4} \cdot d4\phi332(rs319) \cdot SB19oti \cdot ac^4 + \left(\right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{6}{rs319^5} \cdot SB19oti \cdot ac^4 + \frac{6}{rs319^3} \cdot SA19oti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi332(rs319) \right. \\
& \left. + \left(\frac{15}{rs319^6} \cdot SB19oti \cdot ac^4 - \frac{18}{rs319^4} \cdot SA19oti \cdot ac^2 + \frac{3 \cdot lo19}{rs319^2} \right) \right. \\
& \left. \cdot d2\phi332(rs319) + \left(-\frac{15}{rs319^7} \cdot SB19oti \cdot ac^4 + \frac{18}{rs319^5} \cdot SA19oti \cdot ac^2 \right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{3 \cdot lo19}{rs319^3} \right) \cdot d1\phi332(rs319) \right) + \frac{1}{48} \cdot \left(\frac{1}{rs319^4} \cdot d4\phi333(rs319) \right. \\
& \left. \cdot SB19oo \cdot ac^4 + \left(-\frac{6}{rs319^5} \cdot SB19oo \cdot ac^4 + \frac{6}{rs319^3} \cdot SA19oo \cdot ac^2 \right) \right. \\
& \left. \cdot d3\phi333(rs319) + \left(\frac{15}{rs319^6} \cdot SB19oo \cdot ac^4 - \frac{18}{rs319^4} \cdot SA19oo \cdot ac^2 \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{3 \cdot po19}{rs319^2} \right) \cdot d2\phi333(rs319) + \left(-\frac{15}{rs319^7} \cdot SB19oo \cdot ac^4 + \frac{18}{rs319^5} \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot SA19oo \cdot ac^2 - \frac{3 \cdot po19}{rs319^3} \right) \cdot d1\phi333(rs319) \right) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{lo} := & \gamma_{lo1} + \gamma_{lo2} + \gamma_{lo3} + \gamma_{lo4} + \gamma_{lo5} + \gamma_{lo6} + \gamma_{lo7} + \gamma_{lo8} + \gamma_{lo9} \\
& + \gamma_{lo10} + \gamma_{lo11} + \gamma_{lo12} + \gamma_{lo13} + \gamma_{lo14} + \gamma_{lo15} + \gamma_{lo16} + \gamma_{lo17} \\
& + \gamma_{lo18} + \gamma_{lo19} :
\end{aligned}$$

#Calculating the parameter gamma γ_2

$$\begin{aligned}
> \gamma_{sr1} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs11^4} \cdot SC1srsr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\phi111(rs11) + \left(-\frac{6}{rs11^5} \cdot SC1srsr \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot ac^4 + \frac{1}{rs11^3} \cdot SD1srsr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi111(rs11) + \left(\frac{15}{rs11^6} \cdot SC1srsr \cdot ac^4 \right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{3}{rs11^4} \cdot SD1srsr \cdot ac^2 + \frac{msr1}{rs11^2} \right) \cdot d2\phi111(rs11) + \left(-\frac{15}{rs11^7} \cdot SC1srsr \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot ac^4 + \frac{3}{rs11^5} \cdot SD1srsr \cdot ac^2 - \frac{msr1}{rs11^3} \right) \cdot d1\phi111(rs11) \right) \\
& + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs11^4} \cdot SC1srti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\phi112(rs11) + \left(-\frac{6}{rs11^5} \cdot SC1srti \cdot ac^4 \right. \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{rs11^3} \cdot SD1srti \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi112(rs11) + \left(\frac{15}{rs11^6} \cdot SC1srti \cdot ac^4 \right. \\
& - \left. \frac{3}{rs11^4} \cdot SD1srti \cdot ac^2 + \frac{lsr1}{rs11^2} \right) \cdot d2\varphi112(rs11) + \left(-\frac{15}{rs11^7} \cdot SC1srti \right. \\
& \cdot ac^4 + \left. \frac{3}{rs11^5} \cdot SD1srti \cdot ac^2 - \frac{lsr1}{rs11^3} \right) \cdot d1\varphi112(rs11) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs11^4} \right. \right. \\
& \cdot SC1sro \cdot ac^4 \Big) \cdot d4\varphi113(rs11) + \left(-\frac{6}{rs11^5} \cdot SC1sro \cdot ac^4 + \frac{1}{rs11^3} \right. \\
& \cdot SD1sro \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi113(rs11) + \left(\frac{15}{rs11^6} \cdot SC1sro \cdot ac^4 - \frac{3}{rs11^4} \cdot SD1sro \right. \\
& \cdot ac^2 + \left. \frac{psr1}{rs11^2} \right) \cdot d2\varphi113(rs11) + \left(-\frac{15}{rs11^7} \cdot SC1sro \cdot ac^4 + \frac{3}{rs11^5} \right. \\
& \cdot SD1sro \cdot ac^2 - \left. \frac{psr1}{rs11^3} \right) \cdot d1\varphi113(rs11) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{sr2} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs12^4} \cdot SC2srsr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi111(rs12) + \left(-\frac{6}{rs12^5} \cdot SC2srsr \right. \right. \\
& \cdot ac^4 + \left. \frac{1}{rs12^3} \cdot SD2srsr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi111(rs12) + \left(\frac{15}{rs12^6} \cdot SC2srsr \cdot ac^4 \right. \\
& - \left. \frac{3}{rs12^4} \cdot SD2srsr \cdot ac^2 + \frac{msr2}{rs12^2} \right) \cdot d2\varphi111(rs12) + \left(-\frac{15}{rs12^7} \cdot SC2srsr \right. \\
& \cdot ac^4 + \left. \frac{3}{rs12^5} \cdot SD2srsr \cdot ac^2 - \frac{msr2}{rs12^3} \right) \cdot d1\varphi111(rs12) \Big) \\
& + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs12^4} \cdot SC2srti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi112(rs12) + \left(-\frac{6}{rs12^5} \cdot SC2srti \cdot ac^4 \right. \right. \\
& + \left. \frac{1}{rs12^3} \cdot SD2srti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi112(rs12) + \left(\frac{15}{rs12^6} \cdot SC2srti \cdot ac^4 \right. \\
& - \left. \frac{3}{rs12^4} \cdot SD2srti \cdot ac^2 + \frac{lsr2}{rs12^2} \right) \cdot d2\varphi112(rs12) + \left(-\frac{15}{rs12^7} \cdot SC2srti \right. \\
& \cdot ac^4 + \left. \frac{3}{rs12^5} \cdot SD2srti \cdot ac^2 - \frac{lsr2}{rs12^3} \right) \cdot d1\varphi112(rs12) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs12^4} \right. \right. \\
& \cdot SC2sro \cdot ac^4 \Big) \cdot d4\varphi113(rs12) + \left(-\frac{6}{rs12^5} \cdot SC2sro \cdot ac^4 + \frac{1}{rs12^3} \right. \\
& \cdot SD2sro \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi113(rs12) + \left(\frac{15}{rs12^6} \cdot SC2sro \cdot ac^4 - \frac{3}{rs12^4} \cdot SD2sro \right. \\
& \cdot ac^2 + \left. \frac{psr2}{rs12^2} \right) \cdot d2\varphi113(rs12) + \left(-\frac{15}{rs12^7} \cdot SC2sro \cdot ac^4 + \frac{3}{rs12^5} \right. \\
& \cdot SD2sro \cdot ac^2 - \left. \frac{psr2}{rs12^3} \right) \cdot d1\varphi113(rs12) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{sr3} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs13^4} \cdot SC3srsr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi111(rs13) + \left(-\frac{6}{rs13^5} \cdot SC3srsr \right. \right. \\
& \cdot ac^4 + \left. \frac{1}{rs13^3} \cdot SD3srsr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi111(rs13) + \left(\frac{15}{rs13^6} \cdot SC3srsr \cdot ac^4 \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{3}{rs13^4} \cdot SD3srsr \cdot ac^2 + \frac{msr3}{rs13^2} \Big) \cdot d2\varphi111(rs13) + \left(- \frac{15}{rs13^7} \cdot SC3srsr \right. \\
& \cdot ac^4 + \left. \frac{3}{rs13^5} \cdot SD3srsr \cdot ac^2 - \frac{msr3}{rs13^3} \right) \cdot d1\varphi111(rs13) \Big) \\
& + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs13^4} \cdot SC3srti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi112(rs13) + \left(- \frac{6}{rs13^5} \cdot SC3srti \cdot ac^4 \right. \right. \\
& + \left. \left. \frac{1}{rs13^3} \cdot SD3srti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi112(rs13) + \left(\frac{15}{rs13^6} \cdot SC3srti \cdot ac^4 \right. \right. \\
& - \left. \left. \frac{3}{rs13^4} \cdot SD3srti \cdot ac^2 + \frac{lsr3}{rs13^2} \right) \cdot d2\varphi112(rs13) + \left(- \frac{15}{rs13^7} \cdot SC3srti \right. \right. \\
& \cdot ac^4 + \left. \left. \frac{3}{rs13^5} \cdot SD3srti \cdot ac^2 - \frac{lsr3}{rs13^3} \right) \cdot d1\varphi112(rs13) \right) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs13^4} \right. \right. \\
& \cdot SC3sro \cdot ac^4 \Big) \cdot d4\varphi113(rs13) + \left(- \frac{6}{rs13^5} \cdot SC3sro \cdot ac^4 + \frac{1}{rs13^3} \right. \\
& \cdot SD3sro \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi113(rs13) + \left(\frac{15}{rs13^6} \cdot SC3sro \cdot ac^4 - \frac{3}{rs13^4} \cdot SD3sro \right. \\
& \cdot ac^2 + \frac{psr3}{rs13^2} \Big) \cdot d2\varphi113(rs13) + \left(- \frac{15}{rs13^7} \cdot SC3sro \cdot ac^4 + \frac{3}{rs13^5} \right. \\
& \cdot SD3sro \cdot ac^2 - \left. \frac{psr3}{rs13^3} \right) \cdot d1\varphi113(rs13) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varphi_{sr4} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs14^4} \cdot SC4srsr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi111(rs14) + \left(- \frac{6}{rs14^5} \cdot SC4srsr \right. \right. \\
& \cdot ac^4 + \left. \left. \frac{1}{rs14^3} \cdot SD4srsr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi111(rs14) + \left(\frac{15}{rs14^6} \cdot SC4srsr \cdot ac^4 \right. \right. \\
& - \left. \left. \frac{3}{rs14^4} \cdot SD4srsr \cdot ac^2 + \frac{msr4}{rs14^2} \right) \cdot d2\varphi111(rs14) + \left(- \frac{15}{rs14^7} \cdot SC4srsr \right. \right. \\
& \cdot ac^4 + \left. \left. \frac{3}{rs14^5} \cdot SD4srsr \cdot ac^2 - \frac{msr4}{rs14^3} \right) \cdot d1\varphi111(rs14) \right) \\
& + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs14^4} \cdot SC4srti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi112(rs14) + \left(- \frac{6}{rs14^5} \cdot SC4srti \cdot ac^4 \right. \right. \\
& + \left. \left. \frac{1}{rs14^3} \cdot SD4srti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi112(rs14) + \left(\frac{15}{rs14^6} \cdot SC4srti \cdot ac^4 \right. \right. \\
& - \left. \left. \frac{3}{rs14^4} \cdot SD4srti \cdot ac^2 + \frac{lsr4}{rs14^2} \right) \cdot d2\varphi112(rs14) + \left(- \frac{15}{rs14^7} \cdot SC4srti \right. \right. \\
& \cdot ac^4 + \left. \left. \frac{3}{rs14^5} \cdot SD4srti \cdot ac^2 - \frac{lsr4}{rs14^3} \right) \cdot d1\varphi112(rs14) \right) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs14^4} \right. \right. \\
& \cdot SC4sro \cdot ac^4 \Big) \cdot d4\varphi113(rs14) + \left(- \frac{6}{rs14^5} \cdot SC4sro \cdot ac^4 + \frac{1}{rs14^3} \right. \\
& \cdot SD4sro \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi113(rs14) + \left(\frac{15}{rs14^6} \cdot SC4sro \cdot ac^4 - \frac{3}{rs14^4} \cdot SD4sro \right. \\
& \cdot ac^2 + \frac{psr4}{rs14^2} \Big) \cdot d2\varphi113(rs14) + \left(- \frac{15}{rs14^7} \cdot SC4sro \cdot ac^4 + \frac{3}{rs14^5} \right.
\end{aligned}$$

$$\cdot SD4sro \cdot ac^2 - \frac{psr4}{rs14^3} \Big) \cdot d1\varphi113(rs14) \Big) :$$

$$\begin{aligned} > \gamma_{2sr5} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs15^4} \cdot SC5srsr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi111(rs15) + \left(-\frac{6}{rs15^5} \cdot SC5srsr \right. \right. \\ & \cdot ac^4 + \frac{1}{rs15^3} \cdot SD5srsr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi111(rs15) + \left(\frac{15}{rs15^6} \cdot SC5srsr \cdot ac^4 \right. \\ & \left. - \frac{3}{rs15^4} \cdot SD5srsr \cdot ac^2 + \frac{msr5}{rs15^2} \right) \cdot d2\varphi111(rs15) + \left(-\frac{15}{rs15^7} \cdot SC5srsr \right. \\ & \left. \cdot ac^4 + \frac{3}{rs15^5} \cdot SD5srsr \cdot ac^2 - \frac{msr5}{rs15^3} \right) \cdot d1\varphi111(rs15) \Big) \\ & + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs15^4} \cdot SC5srti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi112(rs15) + \left(-\frac{6}{rs15^5} \cdot SC5srti \cdot ac^4 \right. \right. \\ & \left. + \frac{1}{rs15^3} \cdot SD5srti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi112(rs15) + \left(\frac{15}{rs15^6} \cdot SC5srti \cdot ac^4 \right. \\ & \left. - \frac{3}{rs15^4} \cdot SD5srti \cdot ac^2 + \frac{lsr5}{rs15^2} \right) \cdot d2\varphi112(rs15) + \left(-\frac{15}{rs15^7} \cdot SC5srti \right. \\ & \left. \cdot ac^4 + \frac{3}{rs15^5} \cdot SD5srti \cdot ac^2 - \frac{lsr5}{rs15^3} \right) \cdot d1\varphi112(rs15) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs15^4} \right. \right. \\ & \left. \cdot SC5sro \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi113(rs15) + \left(-\frac{6}{rs15^5} \cdot SC5sro \cdot ac^4 + \frac{1}{rs15^3} \right. \\ & \left. \cdot SD5sro \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi113(rs15) + \left(\frac{15}{rs15^6} \cdot SC5sro \cdot ac^4 - \frac{3}{rs15^4} \cdot SD5sro \right. \\ & \left. \cdot ac^2 + \frac{psr5}{rs15^2} \right) \cdot d2\varphi113(rs15) + \left(-\frac{15}{rs15^7} \cdot SC5sro \cdot ac^4 + \frac{3}{rs15^5} \right. \\ & \left. \cdot SD5sro \cdot ac^2 - \frac{psr5}{rs15^3} \right) \cdot d1\varphi113(rs15) \Big) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > \gamma_{2sr6} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs16^4} \cdot SC6srsr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi111(rs16) + \left(-\frac{6}{rs16^5} \cdot SC6srsr \right. \right. \\ & \cdot ac^4 + \frac{1}{rs16^3} \cdot SD6srsr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi111(rs16) + \left(\frac{15}{rs16^6} \cdot SC6srsr \cdot ac^4 \right. \\ & \left. - \frac{3}{rs16^4} \cdot SD6srsr \cdot ac^2 + \frac{msr6}{rs16^2} \right) \cdot d2\varphi111(rs16) + \left(-\frac{15}{rs16^7} \cdot SC6srsr \right. \\ & \left. \cdot ac^4 + \frac{3}{rs16^5} \cdot SD6srsr \cdot ac^2 - \frac{msr6}{rs16^3} \right) \cdot d1\varphi111(rs16) \Big) \\ & + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs16^4} \cdot SC6srti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi112(rs16) + \left(-\frac{6}{rs16^5} \cdot SC6srti \cdot ac^4 \right. \right. \\ & \left. + \frac{1}{rs16^3} \cdot SD6srti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi112(rs16) + \left(\frac{15}{rs16^6} \cdot SC6srti \cdot ac^4 \right. \\ & \left. - \frac{3}{rs16^4} \cdot SD6srti \cdot ac^2 + \frac{lsr6}{rs16^2} \right) \cdot d2\varphi112(rs16) + \left(-\frac{15}{rs16^7} \cdot SC6srti \right. \\ & \left. \cdot ac^4 + \frac{3}{rs16^5} \cdot SD6srti \cdot ac^2 - \frac{lsr6}{rs16^3} \right) \cdot d1\varphi112(rs16) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs16^4} \right. \right. \\ & \left. \cdot SC6sro \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi113(rs16) + \left(-\frac{6}{rs16^5} \cdot SC6sro \cdot ac^4 + \frac{1}{rs16^3} \right. \\ & \left. \cdot SD6sro \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi113(rs16) + \left(\frac{15}{rs16^6} \cdot SC6sro \cdot ac^4 - \frac{3}{rs16^4} \cdot SD6sro \right. \\ & \left. \cdot ac^2 + \frac{psr6}{rs16^2} \right) \cdot d2\varphi113(rs16) + \left(-\frac{15}{rs16^7} \cdot SC6sro \cdot ac^4 + \frac{3}{rs16^5} \right. \\ & \left. \cdot SD6sro \cdot ac^2 - \frac{psr6}{rs16^3} \right) \cdot d1\varphi113(rs16) \Big) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot SC6sro \cdot ac^4) \cdot d4\phi113(rs16) + \left(-\frac{6}{rs16^5} \cdot SC6sro \cdot ac^4 + \frac{1}{rs16^3} \right. \\
& \cdot SD6sro \cdot ac^2) \cdot d3\phi113(rs16) + \left(\frac{15}{rs16^6} \cdot SC6sro \cdot ac^4 - \frac{3}{rs16^4} \cdot SD6sro \right. \\
& \cdot ac^2 + \frac{psr6}{rs16^2}) \cdot d2\phi113(rs16) + \left(-\frac{15}{rs16^7} \cdot SC6sro \cdot ac^4 + \frac{3}{rs16^5} \right. \\
& \left. \cdot SD6sro \cdot ac^2 - \frac{psr6}{rs16^3} \right) \cdot d1\phi113(rs16) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varphi_{sr7} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs17^4} \cdot SC7srsr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\phi111(rs17) + \left(-\frac{6}{rs17^5} \cdot SC7srsr \right. \right. \\
& \cdot ac^4 + \frac{1}{rs17^3} \cdot SD7srsr \cdot ac^2) \cdot d3\phi111(rs17) + \left(\frac{15}{rs17^6} \cdot SC7srsr \cdot ac^4 \right. \\
& \left. - \frac{3}{rs17^4} \cdot SD7srsr \cdot ac^2 + \frac{msr7}{rs17^2} \right) \cdot d2\phi111(rs17) + \left(-\frac{15}{rs17^7} \cdot SC7srsr \right. \\
& \left. \cdot ac^4 + \frac{3}{rs17^5} \cdot SD7srsr \cdot ac^2 - \frac{msr7}{rs17^3} \right) \cdot d1\phi111(rs17) \Big) \\
& + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs17^4} \cdot SC7srti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\phi112(rs17) + \left(-\frac{6}{rs17^5} \cdot SC7srti \cdot ac^4 \right. \right. \\
& \left. + \frac{1}{rs17^3} \cdot SD7srti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi112(rs17) + \left(\frac{15}{rs17^6} \cdot SC7srti \cdot ac^4 \right. \\
& \left. - \frac{3}{rs17^4} \cdot SD7srti \cdot ac^2 + \frac{lsr7}{rs17^2} \right) \cdot d2\phi112(rs17) + \left(-\frac{15}{rs17^7} \cdot SC7srti \right. \\
& \left. \cdot ac^4 + \frac{3}{rs17^5} \cdot SD7srti \cdot ac^2 - \frac{lsr7}{rs17^3} \right) \cdot d1\phi112(rs17) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs17^4} \right. \right. \\
& \cdot SC7sro \cdot ac^4) \cdot d4\phi113(rs17) + \left(-\frac{6}{rs17^5} \cdot SC7sro \cdot ac^4 + \frac{1}{rs17^3} \right. \\
& \cdot SD7sro \cdot ac^2) \cdot d3\phi113(rs17) + \left(\frac{15}{rs17^6} \cdot SC7sro \cdot ac^4 - \frac{3}{rs17^4} \cdot SD7sro \right. \\
& \cdot ac^2 + \frac{psr7}{rs17^2}) \cdot d2\phi113(rs17) + \left(-\frac{15}{rs17^7} \cdot SC7sro \cdot ac^4 + \frac{3}{rs17^5} \right. \\
& \left. \cdot SD7sro \cdot ac^2 - \frac{psr7}{rs17^3} \right) \cdot d1\phi113(rs17) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varphi_{sr8} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs18^4} \cdot SC8srsr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\phi111(rs18) + \left(-\frac{6}{rs18^5} \cdot SC8srsr \right. \right. \\
& \cdot ac^4 + \frac{1}{rs18^3} \cdot SD8srsr \cdot ac^2) \cdot d3\phi111(rs18) + \left(\frac{15}{rs18^6} \cdot SC8srsr \cdot ac^4 \right. \\
& \left. - \frac{3}{rs18^4} \cdot SD8srsr \cdot ac^2 + \frac{msr8}{rs18^2} \right) \cdot d2\phi111(rs18) + \left(-\frac{15}{rs18^7} \cdot SC8srsr \right. \\
& \left. \cdot ac^4 + \frac{3}{rs18^5} \cdot SD8srsr \cdot ac^2 - \frac{msr8}{rs18^3} \right) \cdot d1\phi111(rs18) \Big) \\
& + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs18^4} \cdot SC8srti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\phi112(rs18) + \left(-\frac{6}{rs18^5} \cdot SC8srti \cdot ac^4 \right. \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{rs18^3} \cdot SD8srti \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi112(rs18) + \left(\frac{15}{rs18^6} \cdot SC8srti \cdot ac^4 \right. \\
& - \frac{3}{rs18^4} \cdot SD8srti \cdot ac^2 + \frac{lsr8}{rs18^2} \Big) \cdot d2\varphi112(rs18) + \left(-\frac{15}{rs18^7} \cdot SC8srti \right. \\
& \cdot ac^4 + \frac{3}{rs18^5} \cdot SD8srti \cdot ac^2 - \frac{lsr8}{rs18^3} \Big) \cdot d1\varphi112(rs18) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs18^4} \right. \right. \\
& \cdot SC8sro \cdot ac^4 \Big) \cdot d4\varphi113(rs18) + \left(-\frac{6}{rs18^5} \cdot SC8sro \cdot ac^4 + \frac{1}{rs18^3} \right. \\
& \cdot SD8sro \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi113(rs18) + \left(\frac{15}{rs18^6} \cdot SC8sro \cdot ac^4 - \frac{3}{rs18^4} \cdot SD8sro \right. \\
& \cdot ac^2 + \frac{psr8}{rs18^2} \Big) \cdot d2\varphi113(rs18) + \left(-\frac{15}{rs18^7} \cdot SC8sro \cdot ac^4 + \frac{3}{rs18^5} \right. \\
& \cdot SD8sro \cdot ac^2 - \frac{psr8}{rs18^3} \Big) \cdot d1\varphi113(rs18) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varrho_{sr9} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs19^4} \cdot SC9srsr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi111(rs19) + \left(-\frac{6}{rs19^5} \cdot SC9srsr \right. \right. \\
& \cdot ac^4 + \frac{1}{rs19^3} \cdot SD9srsr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi111(rs19) + \left(\frac{15}{rs19^6} \cdot SC9srsr \cdot ac^4 \right. \\
& - \frac{3}{rs19^4} \cdot SD9srsr \cdot ac^2 + \frac{msr9}{rs19^2} \Big) \cdot d2\varphi111(rs19) + \left(-\frac{15}{rs19^7} \cdot SC9srsr \right. \\
& \cdot ac^4 + \frac{3}{rs19^5} \cdot SD9srsr \cdot ac^2 - \frac{msr9}{rs19^3} \Big) \cdot d1\varphi111(rs19) \Big) \\
& + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs19^4} \cdot SC9srti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi112(rs19) + \left(-\frac{6}{rs19^5} \cdot SC9srti \cdot ac^4 \right. \right. \\
& + \frac{1}{rs19^3} \cdot SD9srti \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi112(rs19) + \left(\frac{15}{rs19^6} \cdot SC9srti \cdot ac^4 \right. \\
& - \frac{3}{rs19^4} \cdot SD9srti \cdot ac^2 + \frac{lsr9}{rs19^2} \Big) \cdot d2\varphi112(rs19) + \left(-\frac{15}{rs19^7} \cdot SC9srti \right. \\
& \cdot ac^4 + \frac{3}{rs19^5} \cdot SD9srti \cdot ac^2 - \frac{lsr9}{rs19^3} \Big) \cdot d1\varphi112(rs19) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs19^4} \right. \right. \\
& \cdot SC9sro \cdot ac^4 \Big) \cdot d4\varphi113(rs19) + \left(-\frac{6}{rs19^5} \cdot SC9sro \cdot ac^4 + \frac{1}{rs19^3} \right. \\
& \cdot SD9sro \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi113(rs19) + \left(\frac{15}{rs19^6} \cdot SC9sro \cdot ac^4 - \frac{3}{rs19^4} \cdot SD9sro \right. \\
& \cdot ac^2 + \frac{psr9}{rs19^2} \Big) \cdot d2\varphi113(rs19) + \left(-\frac{15}{rs19^7} \cdot SC9sro \cdot ac^4 + \frac{3}{rs19^5} \right. \\
& \cdot SD9sro \cdot ac^2 - \frac{psr9}{rs19^3} \Big) \cdot d1\varphi113(rs19) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varrho_{sr10} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs110^4} \cdot SC10srsr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi111(rs110) + \left(-\frac{6}{rs110^5} \right. \right. \\
& \cdot SC10srsr \cdot ac^4 + \frac{1}{rs110^3} \cdot SD10srsr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi111(rs110) + \left(\frac{15}{rs110^6} \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot SC10srsr \cdot ac^4 - \frac{3}{rs110^4} \cdot SD10srsr \cdot ac^2 + \frac{msr10}{rs110^2} \Big) \cdot d2\varphi111(rs110) \\
& + \left(-\frac{15}{rs110^7} \cdot SC10srsr \cdot ac^4 + \frac{3}{rs110^5} \cdot SD10srsr \cdot ac^2 - \frac{msr10}{rs110^3} \right) \\
& \cdot d1\varphi111(rs110) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs110^4} \cdot SC10srti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi112(rs110) \right. \\
& + \left. \left(-\frac{6}{rs110^5} \cdot SC10srti \cdot ac^4 + \frac{1}{rs110^3} \cdot SD10srti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi112(rs110) \right. \\
& + \left. \left(\frac{15}{rs110^6} \cdot SC10srti \cdot ac^4 - \frac{3}{rs110^4} \cdot SD10srti \cdot ac^2 + \frac{lsr10}{rs110^2} \right) \right. \\
& \cdot d2\varphi112(rs110) + \left. \left(-\frac{15}{rs110^7} \cdot SC10srti \cdot ac^4 + \frac{3}{rs110^5} \cdot SD10srti \cdot ac^2 \right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{lsr10}{rs110^3} \right) \cdot d1\varphi112(rs110) \right) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs110^4} \cdot SC10sro \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\varphi113(rs110) + \left. \left(-\frac{6}{rs110^5} \cdot SC10sro \cdot ac^4 + \frac{1}{rs110^3} \cdot SD10sro \cdot ac^2 \right) \right. \\
& \cdot d3\varphi113(rs110) + \left. \left(\frac{15}{rs110^6} \cdot SC10sro \cdot ac^4 - \frac{3}{rs110^4} \cdot SD10sro \cdot ac^2 \right. \right. \\
& + \left. \left. \frac{psr10}{rs110^2} \right) \cdot d2\varphi113(rs110) + \left(-\frac{15}{rs110^7} \cdot SC10sro \cdot ac^4 + \frac{3}{rs110^5} \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot SD10sro \cdot ac^2 - \frac{psr10}{rs110^3} \right) \cdot d1\varphi113(rs110) \right) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varphi_{sr11} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs111^4} \cdot SC11srsr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi111(rs111) + \left(-\frac{6}{rs111^5} \right. \right. \\
& \cdot SC11srsr \cdot ac^4 + \frac{1}{rs111^3} \cdot SD11srsr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi111(rs111) + \left(\frac{15}{rs111^6} \right. \\
& \cdot SC11srsr \cdot ac^4 - \frac{3}{rs111^4} \cdot SD11srsr \cdot ac^2 + \frac{msr11}{rs111^2} \Big) \cdot d2\varphi111(rs111) \\
& + \left(-\frac{15}{rs111^7} \cdot SC11srsr \cdot ac^4 + \frac{3}{rs111^5} \cdot SD11srsr \cdot ac^2 - \frac{msr11}{rs111^3} \right) \\
& \cdot d1\varphi111(rs111) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs111^4} \cdot SC11srti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi112(rs111) \right. \\
& + \left. \left(-\frac{6}{rs111^5} \cdot SC11srti \cdot ac^4 + \frac{1}{rs111^3} \cdot SD11srti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi112(rs111) \right. \\
& + \left. \left(\frac{15}{rs111^6} \cdot SC11srti \cdot ac^4 - \frac{3}{rs111^4} \cdot SD11srti \cdot ac^2 + \frac{lsr11}{rs111^2} \right) \right. \\
& \cdot d2\varphi112(rs111) + \left. \left(-\frac{15}{rs111^7} \cdot SC11srti \cdot ac^4 + \frac{3}{rs111^5} \cdot SD11srti \cdot ac^2 \right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{lsr11}{rs111^3} \right) \cdot d1\varphi112(rs111) \right) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs111^4} \cdot SC11sro \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\varphi113(rs111) + \left. \left(-\frac{6}{rs111^5} \cdot SC11sro \cdot ac^4 + \frac{1}{rs111^3} \cdot SD11sro \cdot ac^2 \right) \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \cdot d3\varphi113(rs111) + \left(\frac{15}{rs111^6} \cdot SC11sro \cdot ac^4 - \frac{3}{rs111^4} \cdot SD11sro \cdot ac^2 \right. \\ & \left. + \frac{psr11}{rs111^2} \right) \cdot d2\varphi113(rs111) + \left(-\frac{15}{rs111^7} \cdot SC11sro \cdot ac^4 + \frac{3}{rs111^5} \right. \\ & \left. \cdot SD11sro \cdot ac^2 - \frac{psr11}{rs111^3} \right) \cdot d1\varphi113(rs111) \Big) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > \varrho_{sr12} := \frac{6}{48} \Big(\left(\frac{1}{rs112^4} \cdot SC12srsr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi111(rs112) + \left(-\frac{6}{rs112^5} \right. \\ & \cdot SC12srsr \cdot ac^4 + \frac{1}{rs112^3} \cdot SD12srsr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi111(rs112) + \left(\frac{15}{rs112^6} \right. \\ & \cdot SC12srsr \cdot ac^4 - \frac{3}{rs112^4} \cdot SD12srsr \cdot ac^2 + \frac{msr12}{rs112^2} \Big) \cdot d2\varphi111(rs112) \\ & + \left(-\frac{15}{rs112^7} \cdot SC12srsr \cdot ac^4 + \frac{3}{rs112^5} \cdot SD12srsr \cdot ac^2 - \frac{msr12}{rs112^3} \right) \\ & \cdot d1\varphi111(rs112) \Big) + \frac{6}{48} \Big(\left(\frac{1}{rs112^4} \cdot SC12srti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi112(rs112) \\ & + \left(-\frac{6}{rs112^5} \cdot SC12srti \cdot ac^4 + \frac{1}{rs112^3} \cdot SD12srti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi112(rs112) \\ & + \left(\frac{15}{rs112^6} \cdot SC12srti \cdot ac^4 - \frac{3}{rs112^4} \cdot SD12srti \cdot ac^2 + \frac{lsr12}{rs112^2} \right) \\ & \cdot d2\varphi112(rs112) + \left(-\frac{15}{rs112^7} \cdot SC12srti \cdot ac^4 + \frac{3}{rs112^5} \cdot SD12srti \cdot ac^2 \right. \\ & \left. - \frac{lsr12}{rs112^3} \right) \cdot d1\varphi112(rs112) \Big) + \frac{6}{48} \Big(\left(\frac{1}{rs112^4} \cdot SC12sro \cdot ac^4 \right) \\ & \cdot d4\varphi113(rs112) + \left(-\frac{6}{rs112^5} \cdot SC12sro \cdot ac^4 + \frac{1}{rs112^3} \cdot SD12sro \cdot ac^2 \right) \\ & \cdot d3\varphi113(rs112) + \left(\frac{15}{rs112^6} \cdot SC12sro \cdot ac^4 - \frac{3}{rs112^4} \cdot SD12sro \cdot ac^2 \right. \\ & \left. + \frac{psr12}{rs112^2} \right) \cdot d2\varphi113(rs112) + \left(-\frac{15}{rs112^7} \cdot SC12sro \cdot ac^4 + \frac{3}{rs112^5} \right. \\ & \left. \cdot SD12sro \cdot ac^2 - \frac{psr12}{rs112^3} \right) \cdot d1\varphi113(rs112) \Big) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > \varrho_{sr13} := \frac{6}{48} \Big(\left(\frac{1}{rs113^4} \cdot SC13srsr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi111(rs113) + \left(-\frac{6}{rs113^5} \right. \\ & \cdot SC13srsr \cdot ac^4 + \frac{1}{rs113^3} \cdot SD13srsr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi111(rs113) + \left(\frac{15}{rs113^6} \right. \\ & \cdot SC13srsr \cdot ac^4 - \frac{3}{rs113^4} \cdot SD13srsr \cdot ac^2 + \frac{msr13}{rs113^2} \Big) \cdot d2\varphi111(rs113) \\ & + \left(-\frac{15}{rs113^7} \cdot SC13srsr \cdot ac^4 + \frac{3}{rs113^5} \cdot SD13srsr \cdot ac^2 - \frac{msr13}{rs113^3} \right) \\ & \cdot d1\varphi111(rs113) \Big) + \frac{6}{48} \Big(\left(\frac{1}{rs113^4} \cdot SC13srti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi112(rs113) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left(-\frac{6}{rs113^5} \cdot SC13srti \cdot ac^4 + \frac{1}{rs113^3} \cdot SD13srti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi112(rs113) \\
& + \left(\frac{15}{rs113^6} \cdot SC13srti \cdot ac^4 - \frac{3}{rs113^4} \cdot SD13srti \cdot ac^2 + \frac{lsr13}{rs113^2} \right) \\
& \cdot d2\phi112(rs113) + \left(-\frac{15}{rs113^7} \cdot SC13srti \cdot ac^4 + \frac{3}{rs113^5} \cdot SD13srti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{lsr13}{rs113^3} \right) \cdot d1\phi112(rs113) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs113^4} \cdot SC13sro \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\phi113(rs113) + \left(-\frac{6}{rs113^5} \cdot SC13sro \cdot ac^4 + \frac{1}{rs113^3} \cdot SD13sro \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\phi113(rs113) + \left(\frac{15}{rs113^6} \cdot SC13sro \cdot ac^4 - \frac{3}{rs113^4} \cdot SD13sro \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{psr13}{rs113^2} \right) \cdot d2\phi113(rs113) + \left(-\frac{15}{rs113^7} \cdot SC13sro \cdot ac^4 + \frac{3}{rs113^5} \right. \\
& \left. \cdot SD13sro \cdot ac^2 - \frac{psr13}{rs113^3} \right) \cdot d1\phi113(rs113) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{sr14} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs114^4} \cdot SC14srsr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\phi111(rs114) + \left(-\frac{6}{rs114^5} \right. \right. \\
& \cdot SC14srsr \cdot ac^4 + \frac{1}{rs114^3} \cdot SD14srsr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\phi111(rs114) + \left(\frac{15}{rs114^6} \right. \\
& \cdot SC14srsr \cdot ac^4 - \frac{3}{rs114^4} \cdot SD14srsr \cdot ac^2 + \frac{msr14}{rs114^2} \Big) \cdot d2\phi111(rs114) \\
& + \left(-\frac{15}{rs114^7} \cdot SC14srsr \cdot ac^4 + \frac{3}{rs114^5} \cdot SD14srsr \cdot ac^2 - \frac{msr14}{rs114^3} \right) \\
& \cdot d1\phi111(rs114) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs114^4} \cdot SC14srti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\phi112(rs114) \right. \\
& + \left(-\frac{6}{rs114^5} \cdot SC14srti \cdot ac^4 + \frac{1}{rs114^3} \cdot SD14srti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi112(rs114) \\
& + \left(\frac{15}{rs114^6} \cdot SC14srti \cdot ac^4 - \frac{3}{rs114^4} \cdot SD14srti \cdot ac^2 + \frac{lsr14}{rs114^2} \right) \\
& \cdot d2\phi112(rs114) + \left(-\frac{15}{rs114^7} \cdot SC14srti \cdot ac^4 + \frac{3}{rs114^5} \cdot SD14srti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{lsr14}{rs114^3} \right) \cdot d1\phi112(rs114) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs114^4} \cdot SC14sro \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\phi113(rs114) + \left(-\frac{6}{rs114^5} \cdot SC14sro \cdot ac^4 + \frac{1}{rs114^3} \cdot SD14sro \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\phi113(rs114) + \left(\frac{15}{rs114^6} \cdot SC14sro \cdot ac^4 - \frac{3}{rs114^4} \cdot SD14sro \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{psr14}{rs114^2} \right) \cdot d2\phi113(rs114) + \left(-\frac{15}{rs114^7} \cdot SC14sro \cdot ac^4 + \frac{3}{rs114^5} \right. \\
& \left. \cdot SD14sro \cdot ac^2 - \frac{psr14}{rs114^3} \right) \cdot d1\phi113(rs114) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varrho_{sr15} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs115^4} \cdot SC15srsr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi111(rs115) + \left(-\frac{6}{rs115^5} \right. \right. \\
& \cdot SC15srsr \cdot ac^4 + \frac{1}{rs115^3} \cdot SD15srsr \cdot ac^2 \left. \right) \cdot d3\varphi111(rs115) + \left(\frac{15}{rs115^6} \right. \\
& \cdot SC15srsr \cdot ac^4 - \frac{3}{rs115^4} \cdot SD15srsr \cdot ac^2 + \frac{msr15}{rs115^2} \left. \right) \cdot d2\varphi111(rs115) \\
& + \left(-\frac{15}{rs115^7} \cdot SC15srsr \cdot ac^4 + \frac{3}{rs115^5} \cdot SD15srsr \cdot ac^2 - \frac{msr15}{rs115^3} \right) \\
& \cdot d1\varphi111(rs115) \left. \right) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs115^4} \cdot SC15srti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi112(rs115) \right. \\
& + \left(-\frac{6}{rs115^5} \cdot SC15srti \cdot ac^4 + \frac{1}{rs115^3} \cdot SD15srti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi112(rs115) \\
& + \left(\frac{15}{rs115^6} \cdot SC15srti \cdot ac^4 - \frac{3}{rs115^4} \cdot SD15srti \cdot ac^2 + \frac{lsr15}{rs115^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi112(rs115) + \left(-\frac{15}{rs115^7} \cdot SC15srti \cdot ac^4 + \frac{3}{rs115^5} \cdot SD15srti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{lsr15}{rs115^3} \right) \cdot d1\varphi112(rs115) \left. \right) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs115^4} \cdot SC15sro \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\varphi113(rs115) + \left(-\frac{6}{rs115^5} \cdot SC15sro \cdot ac^4 + \frac{1}{rs115^3} \cdot SD15sro \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi113(rs115) + \left(\frac{15}{rs115^6} \cdot SC15sro \cdot ac^4 - \frac{3}{rs115^4} \cdot SD15sro \cdot ac^2 \right. \\
& + \frac{psr15}{rs115^2} \left. \right) \cdot d2\varphi113(rs115) + \left(-\frac{15}{rs115^7} \cdot SC15sro \cdot ac^4 + \frac{3}{rs115^5} \right. \\
& \left. \cdot SD15sro \cdot ac^2 - \frac{psr15}{rs115^3} \right) \cdot d1\varphi113(rs115) \left. \right) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varrho_{sr16} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs116^4} \cdot SC16srsr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi111(rs116) + \left(-\frac{6}{rs116^5} \right. \right. \\
& \cdot SC16srsr \cdot ac^4 + \frac{1}{rs116^3} \cdot SD16srsr \cdot ac^2 \left. \right) \cdot d3\varphi111(rs116) + \left(\frac{15}{rs116^6} \right. \\
& \cdot SC16srsr \cdot ac^4 - \frac{3}{rs116^4} \cdot SD16srsr \cdot ac^2 + \frac{msr16}{rs116^2} \left. \right) \cdot d2\varphi111(rs116) \\
& + \left(-\frac{15}{rs116^7} \cdot SC16srsr \cdot ac^4 + \frac{3}{rs116^5} \cdot SD16srsr \cdot ac^2 - \frac{msr16}{rs116^3} \right) \\
& \cdot d1\varphi111(rs116) \left. \right) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs116^4} \cdot SC16srti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi112(rs116) \right. \\
& + \left(-\frac{6}{rs116^5} \cdot SC16srti \cdot ac^4 + \frac{1}{rs116^3} \cdot SD16srti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi112(rs116) \\
& + \left(\frac{15}{rs116^6} \cdot SC16srti \cdot ac^4 - \frac{3}{rs116^4} \cdot SD16srti \cdot ac^2 + \frac{lsr16}{rs116^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi112(rs116) + \left(-\frac{15}{rs116^7} \cdot SC16srti \cdot ac^4 + \frac{3}{rs116^5} \cdot SD16srti \cdot ac^2 \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{lsr16}{rs116^3} \cdot d1\varphi112(rs116) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs116^4} \cdot SC16sro \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\varphi113(rs116) + \left(- \frac{6}{rs116^5} \cdot SC16sro \cdot ac^4 + \frac{1}{rs116^3} \cdot SD16sro \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi113(rs116) + \left(\frac{15}{rs116^6} \cdot SC16sro \cdot ac^4 - \frac{3}{rs116^4} \cdot SD16sro \cdot ac^2 \right. \\
& \left. \left. + \frac{psr16}{rs116^2} \right) \cdot d2\varphi113(rs116) + \left(- \frac{15}{rs116^7} \cdot SC16sro \cdot ac^4 + \frac{3}{rs116^5} \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot SD16sro \cdot ac^2 - \frac{psr16}{rs116^3} \right) \cdot d1\varphi113(rs116) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{sr} := & \gamma_{sr1} + \gamma_{sr2} + \gamma_{sr3} + \gamma_{sr4} + \gamma_{sr5} + \gamma_{sr6} + \gamma_{sr7} + \gamma_{sr8} \\
& + \gamma_{sr9} + \gamma_{sr10} + \gamma_{sr11} + \gamma_{sr12} + \gamma_{sr13} + \gamma_{sr14} + \gamma_{sr15} \\
& + \gamma_{sr16} :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \gamma_{ti1} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs21^4} \cdot SC1tistr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi221(rs21) + \left(- \frac{6}{rs21^5} \cdot SC1tistr \right. \right. \\
& \cdot ac^4 + \frac{1}{rs21^3} \cdot SD1tistr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi221(rs21) + \left(\frac{15}{rs21^6} \cdot SC1tistr \cdot ac^4 \right. \\
& \left. - \frac{3}{rs21^4} \cdot SD1tistr \cdot ac^2 + \frac{mti1}{rs21^2} \right) \cdot d2\varphi221(rs21) + \left(- \frac{15}{rs21^7} \cdot SC1tistr \right. \\
& \cdot ac^4 + \frac{3}{rs21^5} \cdot SD1tistr \cdot ac^2 - \frac{mti1}{rs21^3} \Big) \cdot d1\varphi221(rs21) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs21^4} \right. \right. \\
& \cdot SC1titi \cdot ac^4 \Big) \cdot d4\varphi222(rs21) + \left(- \frac{6}{rs21^5} \cdot SC1titi \cdot ac^4 + \frac{1}{rs21^3} \cdot SD1titi \right. \\
& \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi222(rs21) + \left(\frac{15}{rs21^6} \cdot SC1titi \cdot ac^4 - \frac{3}{rs21^4} \cdot SD1titi \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{ltil}{rs21^2} \right) \cdot d2\varphi222(rs21) + \left(- \frac{15}{rs21^7} \cdot SC1titi \cdot ac^4 + \frac{3}{rs21^5} \cdot SD1titi \right. \\
& \cdot ac^2 - \frac{ltil}{rs21^3} \Big) \cdot d1\varphi222(rs21) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs21^4} \cdot SC1tio \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\varphi223(rs21) + \left(- \frac{6}{rs21^5} \cdot SC1tio \cdot ac^4 + \frac{1}{rs21^3} \cdot SD1tio \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi223(rs21) + \left(\frac{15}{rs21^6} \cdot SC1tio \cdot ac^4 - \frac{3}{rs21^4} \cdot SD1tio \cdot ac^2 + \frac{pti1}{rs21^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi223(rs21) + \left(- \frac{15}{rs21^7} \cdot SC1tio \cdot ac^4 + \frac{3}{rs21^5} \cdot SD1tio \cdot ac^2 \right. \\
& \left. \left. - \frac{pti1}{rs21^3} \right) \cdot d1\varphi223(rs21) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varphi_{ti2} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs22^4} \cdot SC2tistr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi221(rs22) + \left(-\frac{6}{rs22^5} \cdot SC2tistr \right. \right. \\
& \cdot ac^4 + \left. \frac{1}{rs22^3} \cdot SD2tistr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi221(rs22) + \left(\frac{15}{rs22^6} \cdot SC2tistr \cdot ac^4 \right. \\
& \left. - \frac{3}{rs22^4} \cdot SD2tistr \cdot ac^2 + \frac{mti2}{rs22^2} \right) \cdot d2\varphi221(rs22) + \left(-\frac{15}{rs22^7} \cdot SC2tistr \right. \\
& \left. \cdot ac^4 + \frac{3}{rs22^5} \cdot SD2tistr \cdot ac^2 - \frac{mti2}{rs22^3} \right) \cdot d1\varphi221(rs22) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs22^4} \right. \right. \\
& \cdot SC2titi \cdot ac^4 \Big) \cdot d4\varphi222(rs22) + \left(-\frac{6}{rs22^5} \cdot SC2titi \cdot ac^4 + \frac{1}{rs22^3} \cdot SD2titi \right. \\
& \left. \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi222(rs22) + \left(\frac{15}{rs22^6} \cdot SC2titi \cdot ac^4 - \frac{3}{rs22^4} \cdot SD2titi \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{liti2}{rs22^2} \right) \cdot d2\varphi222(rs22) + \left(-\frac{15}{rs22^7} \cdot SC2titi \cdot ac^4 + \frac{3}{rs22^5} \cdot SD2titi \right. \\
& \left. \cdot ac^2 - \frac{liti2}{rs22^3} \right) \cdot d1\varphi222(rs22) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs22^4} \cdot SC2tio \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\varphi223(rs22) + \left(-\frac{6}{rs22^5} \cdot SC2tio \cdot ac^4 + \frac{1}{rs22^3} \cdot SD2tio \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi223(rs22) + \left(\frac{15}{rs22^6} \cdot SC2tio \cdot ac^4 - \frac{3}{rs22^4} \cdot SD2tio \cdot ac^2 + \frac{pti2}{rs22^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi223(rs22) + \left(-\frac{15}{rs22^7} \cdot SC2tio \cdot ac^4 + \frac{3}{rs22^5} \cdot SD2tio \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{pti2}{rs22^3} \right) \cdot d1\varphi223(rs22) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varphi_{ti3} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs23^4} \cdot SC3tistr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi221(rs23) + \left(-\frac{6}{rs23^5} \cdot SC3tistr \right. \right. \\
& \cdot ac^4 + \left. \frac{1}{rs23^3} \cdot SD3tistr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi221(rs23) + \left(\frac{15}{rs23^6} \cdot SC3tistr \cdot ac^4 \right. \\
& \left. - \frac{3}{rs23^4} \cdot SD3tistr \cdot ac^2 + \frac{mti3}{rs23^2} \right) \cdot d2\varphi221(rs23) + \left(-\frac{15}{rs23^7} \cdot SC3tistr \right. \\
& \left. \cdot ac^4 + \frac{3}{rs23^5} \cdot SD3tistr \cdot ac^2 - \frac{mti3}{rs23^3} \right) \cdot d1\varphi221(rs23) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs23^4} \right. \right. \\
& \cdot SC3titi \cdot ac^4 \Big) \cdot d4\varphi222(rs23) + \left(-\frac{6}{rs23^5} \cdot SC3titi \cdot ac^4 + \frac{1}{rs23^3} \cdot SD3titi \right. \\
& \left. \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi222(rs23) + \left(\frac{15}{rs23^6} \cdot SC3titi \cdot ac^4 - \frac{3}{rs23^4} \cdot SD3titi \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{liti3}{rs23^2} \right) \cdot d2\varphi222(rs23) + \left(-\frac{15}{rs23^7} \cdot SC3titi \cdot ac^4 + \frac{3}{rs23^5} \cdot SD3titi \right. \\
& \left. \cdot ac^2 - \frac{liti3}{rs23^3} \right) \cdot d1\varphi222(rs23) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs23^4} \cdot SC3tio \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\varphi223(rs23) + \left(-\frac{6}{rs23^5} \cdot SC3tio \cdot ac^4 + \frac{1}{rs23^3} \cdot SD3tio \cdot ac^2 \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \cdot d3\varphi223(rs23) + \left(\frac{15}{rs23^6} \cdot SC3tio \cdot ac^4 - \frac{3}{rs23^4} \cdot SD3tio \cdot ac^2 + \frac{pti3}{rs23^2} \right) \\ & \cdot d2\varphi223(rs23) + \left(-\frac{15}{rs23^7} \cdot SC3tio \cdot ac^4 + \frac{3}{rs23^5} \cdot SD3tio \cdot ac^2 \right. \\ & \left. - \frac{pti3}{rs23^3} \right) \cdot d1\varphi223(rs23) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > \varphi2ti4 := \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs24^4} \cdot SC4tistr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi221(rs24) + \left(-\frac{6}{rs24^5} \cdot SC4tistr \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot ac^4 + \frac{1}{rs24^3} \cdot SD4tistr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi221(rs24) + \left(\frac{15}{rs24^6} \cdot SC4tistr \cdot ac^4 \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{3}{rs24^4} \cdot SD4tistr \cdot ac^2 + \frac{mti4}{rs24^2} \right) \cdot d2\varphi221(rs24) + \left(-\frac{15}{rs24^7} \cdot SC4tistr \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot ac^4 + \frac{3}{rs24^5} \cdot SD4tistr \cdot ac^2 - \frac{mti4}{rs24^3} \right) \cdot d1\varphi221(rs24) \right) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs24^4} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot SC4titi \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi222(rs24) + \left(-\frac{6}{rs24^5} \cdot SC4titi \cdot ac^4 + \frac{1}{rs24^3} \cdot SD4titi \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi222(rs24) + \left(\frac{15}{rs24^6} \cdot SC4titi \cdot ac^4 - \frac{3}{rs24^4} \cdot SD4titi \cdot ac^2 \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{lti4}{rs24^2} \right) \cdot d2\varphi222(rs24) + \left(-\frac{15}{rs24^7} \cdot SC4titi \cdot ac^4 + \frac{3}{rs24^5} \cdot SD4titi \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot ac^2 - \frac{lti4}{rs24^3} \right) \cdot d1\varphi222(rs24) \right) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs24^4} \cdot SC4tio \cdot ac^4 \right) \right. \\ & \left. \cdot d4\varphi223(rs24) + \left(-\frac{6}{rs24^5} \cdot SC4tio \cdot ac^4 + \frac{1}{rs24^3} \cdot SD4tio \cdot ac^2 \right) \right. \\ & \left. \cdot d3\varphi223(rs24) + \left(\frac{15}{rs24^6} \cdot SC4tio \cdot ac^4 - \frac{3}{rs24^4} \cdot SD4tio \cdot ac^2 + \frac{pti4}{rs24^2} \right) \right. \\ & \left. \cdot d2\varphi223(rs24) + \left(-\frac{15}{rs24^7} \cdot SC4tio \cdot ac^4 + \frac{3}{rs24^5} \cdot SD4tio \cdot ac^2 \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{pti4}{rs24^3} \right) \cdot d1\varphi223(rs24) \right) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > \varphi2ti5 := \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs25^4} \cdot SC5tistr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi221(rs25) + \left(-\frac{6}{rs25^5} \cdot SC5tistr \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot ac^4 + \frac{1}{rs25^3} \cdot SD5tistr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi221(rs25) + \left(\frac{15}{rs25^6} \cdot SC5tistr \cdot ac^4 \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{3}{rs25^4} \cdot SD5tistr \cdot ac^2 + \frac{mti5}{rs25^2} \right) \cdot d2\varphi221(rs25) + \left(-\frac{15}{rs25^7} \cdot SC5tistr \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot ac^4 + \frac{3}{rs25^5} \cdot SD5tistr \cdot ac^2 - \frac{mti5}{rs25^3} \right) \cdot d1\varphi221(rs25) \right) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs25^4} \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot SC5titi \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi222(rs25) + \left(-\frac{6}{rs25^5} \cdot SC5titi \cdot ac^4 + \frac{1}{rs25^3} \cdot SD5titi \right. \right. \\ & \left. \left. \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi222(rs25) + \left(\frac{15}{rs25^6} \cdot SC5titi \cdot ac^4 - \frac{3}{rs25^4} \cdot SD5titi \cdot ac^2 \right. \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{l_{ti5}}{rs25^2} \cdot d2\varphi222(rs25) + \left(-\frac{15}{rs25^7} \cdot SC5titi \cdot ac^4 + \frac{3}{rs25^5} \cdot SD5titi \right. \\
& \cdot ac^2 - \left. \frac{l_{ti5}}{rs25^3} \right) \cdot d1\varphi222(rs25) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs25^4} \cdot SC5tio \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\varphi223(rs25) + \left(-\frac{6}{rs25^5} \cdot SC5tio \cdot ac^4 + \frac{1}{rs25^3} \cdot SD5tio \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi223(rs25) + \left(\frac{15}{rs25^6} \cdot SC5tio \cdot ac^4 - \frac{3}{rs25^4} \cdot SD5tio \cdot ac^2 + \frac{pti5}{rs25^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi223(rs25) + \left(-\frac{15}{rs25^7} \cdot SC5tio \cdot ac^4 + \frac{3}{rs25^5} \cdot SD5tio \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{pti5}{rs25^3} \right) \cdot d1\varphi223(rs25) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varphi_{ti6} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs26^4} \cdot SC6tistr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi221(rs26) + \left(-\frac{6}{rs26^5} \cdot SC6tistr \right. \right. \\
& \cdot ac^4 + \left. \frac{1}{rs26^3} \cdot SD6tistr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi221(rs26) + \left(\frac{15}{rs26^6} \cdot SC6tistr \cdot ac^4 \right. \\
& \left. - \frac{3}{rs26^4} \cdot SD6tistr \cdot ac^2 + \frac{mti6}{rs26^2} \right) \cdot d2\varphi221(rs26) + \left(-\frac{15}{rs26^7} \cdot SC6tistr \right. \\
& \cdot ac^4 + \left. \frac{3}{rs26^5} \cdot SD6tistr \cdot ac^2 - \frac{mti6}{rs26^3} \right) \cdot d1\varphi221(rs26) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs26^4} \right. \right. \\
& \cdot SC6titi \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi222(rs26) + \left(-\frac{6}{rs26^5} \cdot SC6titi \cdot ac^4 + \frac{1}{rs26^3} \cdot SD6titi \right. \\
& \cdot ac^2 \left. \right) \cdot d3\varphi222(rs26) + \left(\frac{15}{rs26^6} \cdot SC6titi \cdot ac^4 - \frac{3}{rs26^4} \cdot SD6titi \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{l_{ti6}}{rs26^2} \right) \cdot d2\varphi222(rs26) + \left(-\frac{15}{rs26^7} \cdot SC6titi \cdot ac^4 + \frac{3}{rs26^5} \cdot SD6titi \right. \\
& \cdot ac^2 - \left. \frac{l_{ti6}}{rs26^3} \right) \cdot d1\varphi222(rs26) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs26^4} \cdot SC6tio \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\varphi223(rs26) + \left(-\frac{6}{rs26^5} \cdot SC6tio \cdot ac^4 + \frac{1}{rs26^3} \cdot SD6tio \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi223(rs26) + \left(\frac{15}{rs26^6} \cdot SC6tio \cdot ac^4 - \frac{3}{rs26^4} \cdot SD6tio \cdot ac^2 + \frac{pti6}{rs26^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi223(rs26) + \left(-\frac{15}{rs26^7} \cdot SC6tio \cdot ac^4 + \frac{3}{rs26^5} \cdot SD6tio \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{pti6}{rs26^3} \right) \cdot d1\varphi223(rs26) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varphi_{ti7} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs27^4} \cdot SC7tistr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi221(rs27) + \left(-\frac{6}{rs27^5} \cdot SC7tistr \right. \right. \\
& \cdot ac^4 + \left. \frac{1}{rs27^3} \cdot SD7tistr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi221(rs27) + \left(\frac{15}{rs27^6} \cdot SC7tistr \cdot ac^4 \right. \\
& \left. - \frac{3}{rs27^4} \cdot SD7tistr \cdot ac^2 + \frac{mti7}{rs27^2} \right) \cdot d2\varphi221(rs27) + \left(-\frac{15}{rs27^7} \cdot SC7tistr \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot ac^4 + \frac{3}{rs27^5} \cdot SD7tistr \cdot ac^2 - \frac{mti7}{rs27^3} \Big) \cdot d1\varphi221(rs27) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs27^4} \right. \right. \\
& \cdot SC7titi \cdot ac^4 \Big) \cdot d4\varphi222(rs27) + \left(-\frac{6}{rs27^5} \cdot SC7titi \cdot ac^4 + \frac{1}{rs27^3} \cdot SD7titi \right. \\
& \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi222(rs27) + \left(\frac{15}{rs27^6} \cdot SC7titi \cdot ac^4 - \frac{3}{rs27^4} \cdot SD7titi \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{l ti7}{rs27^2} \right) \cdot d2\varphi222(rs27) + \left(-\frac{15}{rs27^7} \cdot SC7titi \cdot ac^4 + \frac{3}{rs27^5} \cdot SD7titi \right. \\
& \cdot ac^2 - \frac{l ti7}{rs27^3} \Big) \cdot d1\varphi222(rs27) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs27^4} \cdot SC7tio \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\varphi223(rs27) + \left(-\frac{6}{rs27^5} \cdot SC7tio \cdot ac^4 + \frac{1}{rs27^3} \cdot SD7tio \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi223(rs27) + \left(\frac{15}{rs27^6} \cdot SC7tio \cdot ac^4 - \frac{3}{rs27^4} \cdot SD7tio \cdot ac^2 + \frac{pti7}{rs27^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi223(rs27) + \left(-\frac{15}{rs27^7} \cdot SC7tio \cdot ac^4 + \frac{3}{rs27^5} \cdot SD7tio \cdot ac^2 \right. \\
& \left. \left. - \frac{pti7}{rs27^3} \right) \cdot d1\varphi223(rs27) \right) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varphi2ti8 := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs28^4} \cdot SC8tistr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi221(rs28) + \left(-\frac{6}{rs28^5} \cdot SC8tistr \right. \right. \\
& \cdot ac^4 + \frac{1}{rs28^3} \cdot SD8tistr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi221(rs28) + \left(\frac{15}{rs28^6} \cdot SC8tistr \cdot ac^4 \right. \\
& \left. - \frac{3}{rs28^4} \cdot SD8tistr \cdot ac^2 + \frac{mti8}{rs28^2} \right) \cdot d2\varphi221(rs28) + \left(-\frac{15}{rs28^7} \cdot SC8tistr \right. \\
& \cdot ac^4 + \frac{3}{rs28^5} \cdot SD8tistr \cdot ac^2 - \frac{mti8}{rs28^3} \Big) \cdot d1\varphi221(rs28) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs28^4} \right. \right. \\
& \cdot SC8titi \cdot ac^4 \Big) \cdot d4\varphi222(rs28) + \left(-\frac{6}{rs28^5} \cdot SC8titi \cdot ac^4 + \frac{1}{rs28^3} \cdot SD8titi \right. \\
& \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi222(rs28) + \left(\frac{15}{rs28^6} \cdot SC8titi \cdot ac^4 - \frac{3}{rs28^4} \cdot SD8titi \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{l ti8}{rs28^2} \right) \cdot d2\varphi222(rs28) + \left(-\frac{15}{rs28^7} \cdot SC8titi \cdot ac^4 + \frac{3}{rs28^5} \cdot SD8titi \right. \\
& \cdot ac^2 - \frac{l ti8}{rs28^3} \Big) \cdot d1\varphi222(rs28) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs28^4} \cdot SC8tio \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\varphi223(rs28) + \left(-\frac{6}{rs28^5} \cdot SC8tio \cdot ac^4 + \frac{1}{rs28^3} \cdot SD8tio \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi223(rs28) + \left(\frac{15}{rs28^6} \cdot SC8tio \cdot ac^4 - \frac{3}{rs28^4} \cdot SD8tio \cdot ac^2 + \frac{pti8}{rs28^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi223(rs28) + \left(-\frac{15}{rs28^7} \cdot SC8tio \cdot ac^4 + \frac{3}{rs28^5} \cdot SD8tio \cdot ac^2 \right. \\
& \left. \left. - \frac{pti8}{rs28^3} \right) \cdot d1\varphi223(rs28) \right) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varphi_{ti9} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs29^4} \cdot SC9tistr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi221(rs29) + \left(-\frac{6}{rs29^5} \cdot SC9tistr \right. \right. \\
& \cdot ac^4 + \left. \frac{1}{rs29^3} \cdot SD9tistr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi221(rs29) + \left(\frac{15}{rs29^6} \cdot SC9tistr \cdot ac^4 \right. \\
& \left. - \frac{3}{rs29^4} \cdot SD9tistr \cdot ac^2 + \frac{mti9}{rs29^2} \right) \cdot d2\varphi221(rs29) + \left(-\frac{15}{rs29^7} \cdot SC9tistr \right. \\
& \left. \cdot ac^4 + \frac{3}{rs29^5} \cdot SD9tistr \cdot ac^2 - \frac{mti9}{rs29^3} \right) \cdot d1\varphi221(rs29) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs29^4} \right. \right. \\
& \cdot SC9titi \cdot ac^4 \Big) \cdot d4\varphi222(rs29) + \left(-\frac{6}{rs29^5} \cdot SC9titi \cdot ac^4 + \frac{1}{rs29^3} \cdot SD9titi \right. \\
& \left. \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi222(rs29) + \left(\frac{15}{rs29^6} \cdot SC9titi \cdot ac^4 - \frac{3}{rs29^4} \cdot SD9titi \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{lti9}{rs29^2} \right) \cdot d2\varphi222(rs29) + \left(-\frac{15}{rs29^7} \cdot SC9titi \cdot ac^4 + \frac{3}{rs29^5} \cdot SD9titi \right. \\
& \left. \cdot ac^2 - \frac{lti9}{rs29^3} \right) \cdot d1\varphi222(rs29) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs29^4} \cdot SC9tio \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\varphi223(rs29) + \left(-\frac{6}{rs29^5} \cdot SC9tio \cdot ac^4 + \frac{1}{rs29^3} \cdot SD9tio \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi223(rs29) + \left(\frac{15}{rs29^6} \cdot SC9tio \cdot ac^4 - \frac{3}{rs29^4} \cdot SD9tio \cdot ac^2 + \frac{pti9}{rs29^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi223(rs29) + \left(-\frac{15}{rs29^7} \cdot SC9tio \cdot ac^4 + \frac{3}{rs29^5} \cdot SD9tio \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{pti9}{rs29^3} \right) \cdot d1\varphi223(rs29) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varphi_{ti10} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs210^4} \cdot SC10tistr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi221(rs210) + \left(-\frac{6}{rs210^5} \right. \right. \\
& \cdot SC10tistr \cdot ac^4 + \left. \frac{1}{rs210^3} \cdot SD10tistr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi221(rs210) + \left(\frac{15}{rs210^6} \right. \\
& \cdot SC10tistr \cdot ac^4 - \frac{3}{rs210^4} \cdot SD10tistr \cdot ac^2 + \frac{mti10}{rs210^2} \Big) \cdot d2\varphi221(rs210) \\
& + \left(-\frac{15}{rs210^7} \cdot SC10tistr \cdot ac^4 + \frac{3}{rs210^5} \cdot SD10tistr \cdot ac^2 - \frac{mti10}{rs210^3} \right) \\
& \cdot d1\varphi221(rs210) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs210^4} \cdot SC10titi \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi222(rs210) \right. \\
& + \left(-\frac{6}{rs210^5} \cdot SC10titi \cdot ac^4 + \frac{1}{rs210^3} \cdot SD10titi \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi222(rs210) \\
& + \left(\frac{15}{rs210^6} \cdot SC10titi \cdot ac^4 - \frac{3}{rs210^4} \cdot SD10titi \cdot ac^2 + \frac{lti10}{rs210^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi222(rs210) + \left(-\frac{15}{rs210^7} \cdot SC10titi \cdot ac^4 + \frac{3}{rs210^5} \cdot SD10titi \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{lti10}{rs210^3} \right) \cdot d1\varphi222(rs210) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs210^4} \cdot SC10tio \cdot ac^4 \right) \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot d4\varphi223(rs210) + \left(-\frac{6}{rs210^5} \cdot SC10tio \cdot ac^4 + \frac{1}{rs210^3} \cdot SD10tio \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi223(rs210) + \left(\frac{15}{rs210^6} \cdot SC10tio \cdot ac^4 - \frac{3}{rs210^4} \cdot SD10tio \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{pti10}{rs210^2} \right) \cdot d2\varphi223(rs210) + \left(-\frac{15}{rs210^7} \cdot SC10tio \cdot ac^4 + \frac{3}{rs210^5} \right. \\
& \left. \cdot SD10tio \cdot ac^2 - \frac{pti10}{rs210^3} \right) \cdot d1\varphi223(rs210) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varphi_{ti11} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs211^4} \cdot SC11tistr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi221(rs211) + \left(-\frac{6}{rs211^5} \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot SC11tistr \cdot ac^4 + \frac{1}{rs211^3} \cdot SD11tistr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi221(rs211) + \left(\frac{15}{rs211^6} \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot SC11tistr \cdot ac^4 - \frac{3}{rs211^4} \cdot SD11tistr \cdot ac^2 + \frac{mti11}{rs211^2} \right) \cdot d2\varphi221(rs211) \right. \\
& \left. + \left(-\frac{15}{rs211^7} \cdot SC11tistr \cdot ac^4 + \frac{3}{rs211^5} \cdot SD11tistr \cdot ac^2 - \frac{mti11}{rs211^3} \right) \right. \\
& \left. \cdot d1\varphi221(rs211) \right) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs211^4} \cdot SC11titi \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi222(rs211) \right. \\
& \left. + \left(-\frac{6}{rs211^5} \cdot SC11titi \cdot ac^4 + \frac{1}{rs211^3} \cdot SD11titi \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi222(rs211) \right. \\
& \left. + \left(\frac{15}{rs211^6} \cdot SC11titi \cdot ac^4 - \frac{3}{rs211^4} \cdot SD11titi \cdot ac^2 + \frac{liti11}{rs211^2} \right) \right. \\
& \left. \cdot d2\varphi222(rs211) + \left(-\frac{15}{rs211^7} \cdot SC11titi \cdot ac^4 + \frac{3}{rs211^5} \cdot SD11titi \cdot ac^2 \right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{liti11}{rs211^3} \right) \cdot d1\varphi222(rs211) \right) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs211^4} \cdot SC11tio \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \left. \cdot d4\varphi223(rs211) + \left(-\frac{6}{rs211^5} \cdot SC11tio \cdot ac^4 + \frac{1}{rs211^3} \cdot SD11tio \cdot ac^2 \right) \right. \\
& \left. \cdot d3\varphi223(rs211) + \left(\frac{15}{rs211^6} \cdot SC11tio \cdot ac^4 - \frac{3}{rs211^4} \cdot SD11tio \cdot ac^2 \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{pti11}{rs211^2} \right) \cdot d2\varphi223(rs211) + \left(-\frac{15}{rs211^7} \cdot SC11tio \cdot ac^4 + \frac{3}{rs211^5} \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot SD11tio \cdot ac^2 - \frac{pti11}{rs211^3} \right) \cdot d1\varphi223(rs211) \right) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varphi_{ti12} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs212^4} \cdot SC12tistr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi221(rs212) + \left(-\frac{6}{rs212^5} \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot SC12tistr \cdot ac^4 + \frac{1}{rs212^3} \cdot SD12tistr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi221(rs212) + \left(\frac{15}{rs212^6} \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot SC12tistr \cdot ac^4 - \frac{3}{rs212^4} \cdot SD12tistr \cdot ac^2 + \frac{mti12}{rs212^2} \right) \cdot d2\varphi221(rs212) \right. \\
& \left. + \left(-\frac{15}{rs212^7} \cdot SC12tistr \cdot ac^4 + \frac{3}{rs212^5} \cdot SD12tistr \cdot ac^2 - \frac{mti12}{rs212^3} \right) \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot d1\varphi221(rs212) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs212^4} \cdot SC12titi \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi222(rs212) \right. \\
& + \left(-\frac{6}{rs212^5} \cdot SC12titi \cdot ac^4 + \frac{1}{rs212^3} \cdot SD12titi \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi222(rs212) \\
& + \left(\frac{15}{rs212^6} \cdot SC12titi \cdot ac^4 - \frac{3}{rs212^4} \cdot SD12titi \cdot ac^2 + \frac{lti12}{rs212^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi222(rs212) + \left(-\frac{15}{rs212^7} \cdot SC12titi \cdot ac^4 + \frac{3}{rs212^5} \cdot SD12titi \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{lti12}{rs212^3} \right) \cdot d1\varphi222(rs212) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs212^4} \cdot SC12tio \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\varphi223(rs212) + \left(-\frac{6}{rs212^5} \cdot SC12tio \cdot ac^4 + \frac{1}{rs212^3} \cdot SD12tio \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi223(rs212) + \left(\frac{15}{rs212^6} \cdot SC12tio \cdot ac^4 - \frac{3}{rs212^4} \cdot SD12tio \cdot ac^2 \right. \\
& + \left. \frac{pti12}{rs212^2} \right) \cdot d2\varphi223(rs212) + \left(-\frac{15}{rs212^7} \cdot SC12tio \cdot ac^4 + \frac{3}{rs212^5} \right. \\
& \left. \cdot SD12tio \cdot ac^2 - \frac{pti12}{rs212^3} \right) \cdot d1\varphi223(rs212) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varphi2ti13 := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs213^4} \cdot SC13tisir \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi221(rs213) + \left(-\frac{6}{rs213^5} \right. \right. \\
& \cdot SC13tisir \cdot ac^4 + \frac{1}{rs213^3} \cdot SD13tisir \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi221(rs213) + \left(\frac{15}{rs213^6} \right. \\
& \cdot SC13tisir \cdot ac^4 - \frac{3}{rs213^4} \cdot SD13tisir \cdot ac^2 + \frac{mti13}{rs213^2} \Big) \cdot d2\varphi221(rs213) \\
& + \left(-\frac{15}{rs213^7} \cdot SC13tisir \cdot ac^4 + \frac{3}{rs213^5} \cdot SD13tisir \cdot ac^2 - \frac{mti13}{rs213^3} \right) \\
& \cdot d1\varphi221(rs213) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs213^4} \cdot SC13titi \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi222(rs213) \right. \\
& + \left(-\frac{6}{rs213^5} \cdot SC13titi \cdot ac^4 + \frac{1}{rs213^3} \cdot SD13titi \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi222(rs213) \\
& + \left(\frac{15}{rs213^6} \cdot SC13titi \cdot ac^4 - \frac{3}{rs213^4} \cdot SD13titi \cdot ac^2 + \frac{lti13}{rs213^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi222(rs213) + \left(-\frac{15}{rs213^7} \cdot SC13titi \cdot ac^4 + \frac{3}{rs213^5} \cdot SD13titi \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{lti13}{rs213^3} \right) \cdot d1\varphi222(rs213) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs213^4} \cdot SC13tio \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\varphi223(rs213) + \left(-\frac{6}{rs213^5} \cdot SC13tio \cdot ac^4 + \frac{1}{rs213^3} \cdot SD13tio \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi223(rs213) + \left(\frac{15}{rs213^6} \cdot SC13tio \cdot ac^4 - \frac{3}{rs213^4} \cdot SD13tio \cdot ac^2 \right. \\
& + \left. \frac{pti13}{rs213^2} \right) \cdot d2\varphi223(rs213) + \left(-\frac{15}{rs213^7} \cdot SC13tio \cdot ac^4 + \frac{3}{rs213^5} \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot SD13tio \cdot ac^2 - \frac{pti13}{rs213^3} \Big) \cdot d1\varphi223(rs213) \Big) : \\
> \varrho_{ti14} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs214^4} \cdot SC14tistr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi221(rs214) + \left(-\frac{6}{rs214^5} \right. \right. \\
& \cdot SC14tistr \cdot ac^4 + \frac{1}{rs214^3} \cdot SD14tistr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi221(rs214) + \left(\frac{15}{rs214^6} \right. \\
& \cdot SC14tistr \cdot ac^4 - \frac{3}{rs214^4} \cdot SD14tistr \cdot ac^2 + \frac{mti14}{rs214^2} \Big) \cdot d2\varphi221(rs214) \\
& + \left(-\frac{15}{rs214^7} \cdot SC14tistr \cdot ac^4 + \frac{3}{rs214^5} \cdot SD14tistr \cdot ac^2 - \frac{mti14}{rs214^3} \right) \\
& \cdot d1\varphi221(rs214) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs214^4} \cdot SC14titi \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi222(rs214) \right. \\
& + \left(-\frac{6}{rs214^5} \cdot SC14titi \cdot ac^4 + \frac{1}{rs214^3} \cdot SD14titi \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi222(rs214) \\
& + \left(\frac{15}{rs214^6} \cdot SC14titi \cdot ac^4 - \frac{3}{rs214^4} \cdot SD14titi \cdot ac^2 + \frac{lti14}{rs214^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi222(rs214) + \left(-\frac{15}{rs214^7} \cdot SC14titi \cdot ac^4 + \frac{3}{rs214^5} \cdot SD14titi \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{lti14}{rs214^3} \right) \cdot d1\varphi222(rs214) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs214^4} \cdot SC14tio \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\varphi223(rs214) + \left(-\frac{6}{rs214^5} \cdot SC14tio \cdot ac^4 + \frac{1}{rs214^3} \cdot SD14tio \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi223(rs214) + \left(\frac{15}{rs214^6} \cdot SC14tio \cdot ac^4 - \frac{3}{rs214^4} \cdot SD14tio \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{pti14}{rs214^2} \right) \cdot d2\varphi223(rs214) + \left(-\frac{15}{rs214^7} \cdot SC14tio \cdot ac^4 + \frac{3}{rs214^5} \right. \\
& \left. \cdot SD14tio \cdot ac^2 - \frac{pti14}{rs214^3} \right) \cdot d1\varphi223(rs214) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varrho_{ti15} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs215^4} \cdot SC15tistr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi221(rs215) + \left(-\frac{6}{rs215^5} \right. \right. \\
& \cdot SC15tistr \cdot ac^4 + \frac{1}{rs215^3} \cdot SD15tistr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi221(rs215) + \left(\frac{15}{rs215^6} \right. \\
& \cdot SC15tistr \cdot ac^4 - \frac{3}{rs215^4} \cdot SD15tistr \cdot ac^2 + \frac{mti15}{rs215^2} \Big) \cdot d2\varphi221(rs215) \\
& + \left(-\frac{15}{rs215^7} \cdot SC15tistr \cdot ac^4 + \frac{3}{rs215^5} \cdot SD15tistr \cdot ac^2 - \frac{mti15}{rs215^3} \right) \\
& \cdot d1\varphi221(rs215) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs215^4} \cdot SC15titi \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi222(rs215) \right. \\
& + \left(-\frac{6}{rs215^5} \cdot SC15titi \cdot ac^4 + \frac{1}{rs215^3} \cdot SD15titi \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi222(rs215) \\
& + \left(\frac{15}{rs215^6} \cdot SC15titi \cdot ac^4 - \frac{3}{rs215^4} \cdot SD15titi \cdot ac^2 + \frac{lti15}{rs215^2} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot d2\varphi222(rs215) + \left(-\frac{15}{rs215^7} \cdot SC15titi \cdot ac^4 + \frac{3}{rs215^5} \cdot SD15titi \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{ltil5}{rs215^3} \right) \cdot d1\varphi222(rs215) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs215^4} \cdot SC15tio \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\varphi223(rs215) + \left(-\frac{6}{rs215^5} \cdot SC15tio \cdot ac^4 + \frac{1}{rs215^3} \cdot SD15tio \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi223(rs215) + \left(\frac{15}{rs215^6} \cdot SC15tio \cdot ac^4 - \frac{3}{rs215^4} \cdot SD15tio \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{pti15}{rs215^2} \right) \cdot d2\varphi223(rs215) + \left(-\frac{15}{rs215^7} \cdot SC15tio \cdot ac^4 + \frac{3}{rs215^5} \right. \\
& \left. \cdot SD15tio \cdot ac^2 - \frac{pti15}{rs215^3} \right) \cdot d1\varphi223(rs215) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varphi_{ti16} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs216^4} \cdot SC16tisir \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi221(rs216) + \left(-\frac{6}{rs216^5} \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot SC16tisir \cdot ac^4 + \frac{1}{rs216^3} \cdot SD16tisir \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi221(rs216) + \left(\frac{15}{rs216^6} \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot SC16tisir \cdot ac^4 - \frac{3}{rs216^4} \cdot SD16tisir \cdot ac^2 + \frac{mti16}{rs216^2} \right) \cdot d2\varphi221(rs216) \right. \\
& \left. + \left(-\frac{15}{rs216^7} \cdot SC16tisir \cdot ac^4 + \frac{3}{rs216^5} \cdot SD16tisir \cdot ac^2 - \frac{mti16}{rs216^3} \right) \right. \\
& \left. \cdot d1\varphi221(rs216) \right) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs216^4} \cdot SC16titi \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi222(rs216) \right. \\
& \left. + \left(-\frac{6}{rs216^5} \cdot SC16titi \cdot ac^4 + \frac{1}{rs216^3} \cdot SD16titi \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi222(rs216) \right. \\
& \left. + \left(\frac{15}{rs216^6} \cdot SC16titi \cdot ac^4 - \frac{3}{rs216^4} \cdot SD16titi \cdot ac^2 + \frac{ltil6}{rs216^2} \right) \right. \\
& \left. \cdot d2\varphi222(rs216) + \left(-\frac{15}{rs216^7} \cdot SC16titi \cdot ac^4 + \frac{3}{rs216^5} \cdot SD16titi \cdot ac^2 \right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{ltil6}{rs216^3} \right) \cdot d1\varphi222(rs216) \right) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs216^4} \cdot SC16tio \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\varphi223(rs216) + \left(-\frac{6}{rs216^5} \cdot SC16tio \cdot ac^4 + \frac{1}{rs216^3} \cdot SD16tio \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi223(rs216) + \left(\frac{15}{rs216^6} \cdot SC16tio \cdot ac^4 - \frac{3}{rs216^4} \cdot SD16tio \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{pti16}{rs216^2} \right) \cdot d2\varphi223(rs216) + \left(-\frac{15}{rs216^7} \cdot SC16tio \cdot ac^4 + \frac{3}{rs216^5} \right. \\
& \left. \cdot SD16tio \cdot ac^2 - \frac{pti16}{rs216^3} \right) \cdot d1\varphi223(rs216) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varphi_{ti} := & \varphi_{ti1} + \varphi_{ti2} + \varphi_{ti3} + \varphi_{ti4} + \varphi_{ti5} + \varphi_{ti6} + \varphi_{ti7} + \varphi_{ti8} + \varphi_{ti7} \\
& + \varphi_{ti8} + \varphi_{ti9} + \varphi_{ti10} + \varphi_{ti11} + \varphi_{ti12} + \varphi_{ti13} + \varphi_{ti14} + \varphi_{ti15}
\end{aligned}$$

+ φ_{ti16} :

$$\begin{aligned}
 > \varphi_{o1} := \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs31^4} \cdot SC1osr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi331(rs31) + \left(-\frac{6}{rs31^5} \cdot SC1osr \cdot ac^4 + \frac{1}{rs31^3} \cdot SD1osr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi331(rs31) + \left(\frac{15}{rs31^6} \cdot SC1osr \cdot ac^4 - \frac{3}{rs31^4} \cdot SD1osr \cdot ac^2 + \frac{mo1}{rs31^2} \right) \cdot d2\varphi331(rs31) + \left(-\frac{15}{rs31^7} \cdot SC1osr \cdot ac^4 + \frac{3}{rs31^5} \cdot SD1osr \cdot ac^2 - \frac{mo1}{rs31^3} \right) \cdot d1\varphi331(rs31) \right) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs31^4} \cdot SC1oti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi332(rs31) + \left(-\frac{6}{rs31^5} \cdot SC1oti \cdot ac^4 + \frac{1}{rs31^3} \cdot SD1oti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi332(rs31) + \left(\frac{15}{rs31^6} \cdot SC1oti \cdot ac^4 - \frac{3}{rs31^4} \cdot SD1oti \cdot ac^2 + \frac{lo1}{rs31^2} \right) \cdot d2\varphi332(rs31) + \left(-\frac{15}{rs31^7} \cdot SC1oti \cdot ac^4 + \frac{3}{rs31^5} \cdot SD1oti \cdot ac^2 - \frac{lo1}{rs31^3} \right) \cdot d1\varphi332(rs31) \right) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs31^4} \cdot SC1oo \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi333(rs31) + \left(-\frac{6}{rs31^5} \cdot SC1oo \cdot ac^4 + \frac{1}{rs31^3} \cdot SD1oo \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi333(rs31) + \left(\frac{15}{rs31^6} \cdot SC1oo \cdot ac^4 - \frac{3}{rs31^4} \cdot SD1oo \cdot ac^2 + \frac{po1}{rs31^2} \right) \cdot d2\varphi333(rs31) + \left(-\frac{15}{rs31^7} \cdot SC1oo \cdot ac^4 + \frac{3}{rs31^5} \cdot SD1oo \cdot ac^2 - \frac{po1}{rs31^3} \right) \cdot d1\varphi333(rs31) \right) :
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 > \varphi_{o2} := \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs32^4} \cdot SC2osr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi331(rs32) + \left(-\frac{6}{rs32^5} \cdot SC2osr \cdot ac^4 + \frac{1}{rs32^3} \cdot SD2osr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi331(rs32) + \left(\frac{15}{rs32^6} \cdot SC2osr \cdot ac^4 - \frac{3}{rs32^4} \cdot SD2osr \cdot ac^2 + \frac{mo2}{rs32^2} \right) \cdot d2\varphi331(rs32) + \left(-\frac{15}{rs32^7} \cdot SC2osr \cdot ac^4 + \frac{3}{rs32^5} \cdot SD2osr \cdot ac^2 - \frac{mo2}{rs32^3} \right) \cdot d1\varphi331(rs32) \right) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs32^4} \cdot SC2oti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi332(rs32) + \left(-\frac{6}{rs32^5} \cdot SC2oti \cdot ac^4 + \frac{1}{rs32^3} \cdot SD2oti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi332(rs32) + \left(\frac{15}{rs32^6} \cdot SC2oti \cdot ac^4 - \frac{3}{rs32^4} \cdot SD2oti \cdot ac^2 + \frac{lo2}{rs32^2} \right) \cdot d2\varphi332(rs32) + \left(-\frac{15}{rs32^7} \cdot SC2oti \cdot ac^4 + \frac{3}{rs32^5} \cdot SD2oti \cdot ac^2 - \frac{lo2}{rs32^3} \right) \cdot d1\varphi332(rs32) \right) :
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot ac^2 - \frac{lo2}{rs32^3} \Big) \cdot d1\varphi332(rs32) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs32^4} \cdot SC2oo \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\varphi333(rs32) + \left(-\frac{6}{rs32^5} \cdot SC2oo \cdot ac^4 + \frac{1}{rs32^3} \cdot SD2oo \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi333(rs32) + \left(\frac{15}{rs32^6} \cdot SC2oo \cdot ac^4 - \frac{3}{rs32^4} \cdot SD2oo \cdot ac^2 + \frac{po2}{rs32^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi333(rs32) + \left(-\frac{15}{rs32^7} \cdot SC2oo \cdot ac^4 + \frac{3}{rs32^5} \cdot SD2oo \cdot ac^2 \right. \\
& \left. \left. - \frac{po2}{rs32^3} \right) \cdot d1\varphi333(rs32) \right) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varphi_{o3} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs33^4} \cdot SC3osr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi331(rs33) + \left(-\frac{6}{rs33^5} \cdot SC3osr \right. \right. \\
& \cdot ac^4 + \frac{1}{rs33^3} \cdot SD3osr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi331(rs33) + \left(\frac{15}{rs33^6} \cdot SC3osr \cdot ac^4 \right. \\
& \left. - \frac{3}{rs33^4} \cdot SD3osr \cdot ac^2 + \frac{mo3}{rs33^2} \right) \cdot d2\varphi331(rs33) + \left(-\frac{15}{rs33^7} \cdot SC3osr \right. \\
& \cdot ac^4 + \frac{3}{rs33^5} \cdot SD3osr \cdot ac^2 - \frac{mo3}{rs33^3} \Big) \cdot d1\varphi331(rs33) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs33^4} \right. \right. \\
& \cdot SC3oti \cdot ac^4 \Big) \cdot d4\varphi332(rs33) + \left(-\frac{6}{rs33^5} \cdot SC3oti \cdot ac^4 + \frac{1}{rs33^3} \cdot SD3oti \right. \\
& \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi332(rs33) + \left(\frac{15}{rs33^6} \cdot SC3oti \cdot ac^4 - \frac{3}{rs33^4} \cdot SD3oti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{lo3}{rs33^2} \right) \cdot d2\varphi332(rs33) + \left(-\frac{15}{rs33^7} \cdot SC3oti \cdot ac^4 + \frac{3}{rs33^5} \cdot SD3oti \right. \\
& \cdot ac^2 - \frac{lo3}{rs33^3} \Big) \cdot d1\varphi332(rs33) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs33^4} \cdot SC3oo \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\varphi333(rs33) + \left(-\frac{6}{rs33^5} \cdot SC3oo \cdot ac^4 + \frac{1}{rs33^3} \cdot SD3oo \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi333(rs33) + \left(\frac{15}{rs33^6} \cdot SC3oo \cdot ac^4 - \frac{3}{rs33^4} \cdot SD3oo \cdot ac^2 + \frac{po3}{rs33^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi333(rs33) + \left(-\frac{15}{rs33^7} \cdot SC3oo \cdot ac^4 + \frac{3}{rs33^5} \cdot SD3oo \cdot ac^2 \right. \\
& \left. \left. - \frac{po3}{rs33^3} \right) \cdot d1\varphi333(rs33) \right) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varphi_{o4} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs34^4} \cdot SC4osr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi331(rs34) + \left(-\frac{6}{rs34^5} \cdot SC4osr \right. \right. \\
& \cdot ac^4 + \frac{1}{rs34^3} \cdot SD4osr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi331(rs34) + \left(\frac{15}{rs34^6} \cdot SC4osr \cdot ac^4 \right. \\
& \left. - \frac{3}{rs34^4} \cdot SD4osr \cdot ac^2 + \frac{mo4}{rs34^2} \right) \cdot d2\varphi331(rs34) + \left(-\frac{15}{rs34^7} \cdot SC4osr \right. \\
& \cdot ac^4 + \frac{3}{rs34^5} \cdot SD4osr \cdot ac^2 - \frac{mo4}{rs34^3} \Big) \cdot d1\varphi331(rs34) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs34^4} \right. \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot SC4oti \cdot ac^4) \cdot d4\phi332(rs34) + \left(-\frac{6}{rs34^5} \cdot SC4oti \cdot ac^4 + \frac{1}{rs34^3} \cdot SD4oti \right. \\
& \cdot ac^2) \cdot d3\phi332(rs34) + \left(\frac{15}{rs34^6} \cdot SC4oti \cdot ac^4 - \frac{3}{rs34^4} \cdot SD4oti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{lo4}{rs34^2} \right) \cdot d2\phi332(rs34) + \left(-\frac{15}{rs34^7} \cdot SC4oti \cdot ac^4 + \frac{3}{rs34^5} \cdot SD4oti \right. \\
& \cdot ac^2 - \frac{lo4}{rs34^3} \left. \right) \cdot d1\phi332(rs34) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs34^4} \cdot SC4oo \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\phi333(rs34) + \left(-\frac{6}{rs34^5} \cdot SC4oo \cdot ac^4 + \frac{1}{rs34^3} \cdot SD4oo \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\phi333(rs34) + \left(\frac{15}{rs34^6} \cdot SC4oo \cdot ac^4 - \frac{3}{rs34^4} \cdot SD4oo \cdot ac^2 + \frac{po4}{rs34^2} \right) \\
& \cdot d2\phi333(rs34) + \left(-\frac{15}{rs34^7} \cdot SC4oo \cdot ac^4 + \frac{3}{rs34^5} \cdot SD4oo \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{po4}{rs34^3} \right) \cdot d1\phi333(rs34) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varrho_{o5} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs35^4} \cdot SC5osr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\phi331(rs35) + \left(-\frac{6}{rs35^5} \cdot SC5osr \right. \right. \\
& \cdot ac^4 + \frac{1}{rs35^3} \cdot SD5osr \cdot ac^2 \left. \right) \cdot d3\phi331(rs35) + \left(\frac{15}{rs35^6} \cdot SC5osr \cdot ac^4 \right. \\
& \left. - \frac{3}{rs35^4} \cdot SD5osr \cdot ac^2 + \frac{mo5}{rs35^2} \right) \cdot d2\phi331(rs35) + \left(-\frac{15}{rs35^7} \cdot SC5osr \right. \\
& \cdot ac^4 + \frac{3}{rs35^5} \cdot SD5osr \cdot ac^2 - \frac{mo5}{rs35^3} \left. \right) \cdot d1\phi331(rs35) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs35^4} \right. \right. \\
& \cdot SC5oti \cdot ac^4) \cdot d4\phi332(rs35) + \left(-\frac{6}{rs35^5} \cdot SC5oti \cdot ac^4 + \frac{1}{rs35^3} \cdot SD5oti \right. \\
& \cdot ac^2) \cdot d3\phi332(rs35) + \left(\frac{15}{rs35^6} \cdot SC5oti \cdot ac^4 - \frac{3}{rs35^4} \cdot SD5oti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{lo5}{rs35^2} \right) \cdot d2\phi332(rs35) + \left(-\frac{15}{rs35^7} \cdot SC5oti \cdot ac^4 + \frac{3}{rs35^5} \cdot SD5oti \right. \\
& \cdot ac^2 - \frac{lo5}{rs35^3} \left. \right) \cdot d1\phi332(rs35) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs35^4} \cdot SC5oo \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\phi333(rs35) + \left(-\frac{6}{rs35^5} \cdot SC5oo \cdot ac^4 + \frac{1}{rs35^3} \cdot SD5oo \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\phi333(rs35) + \left(\frac{15}{rs35^6} \cdot SC5oo \cdot ac^4 - \frac{3}{rs35^4} \cdot SD5oo \cdot ac^2 + \frac{po5}{rs35^2} \right) \\
& \cdot d2\phi333(rs35) + \left(-\frac{15}{rs35^7} \cdot SC5oo \cdot ac^4 + \frac{3}{rs35^5} \cdot SD5oo \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{po5}{rs35^3} \right) \cdot d1\phi333(rs35) :
\end{aligned}$$

$$> \varrho_{o6} := \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs36^4} \cdot SC6osr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\phi331(rs36) + \left(-\frac{6}{rs36^5} \cdot SC6osr \right. \right.$$

$$\begin{aligned}
& \cdot ac^4 + \frac{1}{rs36^3} \cdot SD6osr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\phi331(rs36) + \left(\frac{15}{rs36^6} \cdot SC6osr \cdot ac^4 \right. \\
& \left. - \frac{3}{rs36^4} \cdot SD6osr \cdot ac^2 + \frac{mo6}{rs36^2} \right) \cdot d2\phi331(rs36) + \left(-\frac{15}{rs36^7} \cdot SC6osr \right. \\
& \left. \cdot ac^4 + \frac{3}{rs36^5} \cdot SD6osr \cdot ac^2 - \frac{mo6}{rs36^3} \right) \cdot d1\phi331(rs36) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs36^4} \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot SC6oti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\phi332(rs36) + \left(-\frac{6}{rs36^5} \cdot SC6oti \cdot ac^4 + \frac{1}{rs36^3} \cdot SD6oti \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi332(rs36) + \left(\frac{15}{rs36^6} \cdot SC6oti \cdot ac^4 - \frac{3}{rs36^4} \cdot SD6oti \cdot ac^2 \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{lo6}{rs36^2} \right) \cdot d2\phi332(rs36) + \left(-\frac{15}{rs36^7} \cdot SC6oti \cdot ac^4 + \frac{3}{rs36^5} \cdot SD6oti \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot ac^2 - \frac{lo6}{rs36^3} \right) \cdot d1\phi332(rs36) \right) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs36^4} \cdot SC6oo \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \left. \cdot d4\phi333(rs36) + \left(-\frac{6}{rs36^5} \cdot SC6oo \cdot ac^4 + \frac{1}{rs36^3} \cdot SD6oo \cdot ac^2 \right) \right. \\
& \left. \cdot d3\phi333(rs36) + \left(\frac{15}{rs36^6} \cdot SC6oo \cdot ac^4 - \frac{3}{rs36^4} \cdot SD6oo \cdot ac^2 + \frac{po6}{rs36^2} \right) \right. \\
& \left. \cdot d2\phi333(rs36) + \left(-\frac{15}{rs36^7} \cdot SC6oo \cdot ac^4 + \frac{3}{rs36^5} \cdot SD6oo \cdot ac^2 \right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{po6}{rs36^3} \right) \cdot d1\phi333(rs36) \right) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varrho_{o7} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs37^4} \cdot SC7osr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\phi331(rs37) + \left(-\frac{6}{rs37^5} \cdot SC7osr \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot ac^4 + \frac{1}{rs37^3} \cdot SD7osr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi331(rs37) + \left(\frac{15}{rs37^6} \cdot SC7osr \cdot ac^4 \right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{3}{rs37^4} \cdot SD7osr \cdot ac^2 + \frac{mo7}{rs37^2} \right) \cdot d2\phi331(rs37) + \left(-\frac{15}{rs37^7} \cdot SC7osr \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot ac^4 + \frac{3}{rs37^5} \cdot SD7osr \cdot ac^2 - \frac{mo7}{rs37^3} \right) \cdot d1\phi331(rs37) \right) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs37^4} \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot SC7oti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\phi332(rs37) + \left(-\frac{6}{rs37^5} \cdot SC7oti \cdot ac^4 + \frac{1}{rs37^3} \cdot SD7oti \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi332(rs37) + \left(\frac{15}{rs37^6} \cdot SC7oti \cdot ac^4 - \frac{3}{rs37^4} \cdot SD7oti \cdot ac^2 \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{lo7}{rs37^2} \right) \cdot d2\phi332(rs37) + \left(-\frac{15}{rs37^7} \cdot SC7oti \cdot ac^4 + \frac{3}{rs37^5} \cdot SD7oti \right. \right. \\
& \left. \left. \cdot ac^2 - \frac{lo7}{rs37^3} \right) \cdot d1\phi332(rs37) \right) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs37^4} \cdot SC7oo \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \left. \cdot d4\phi333(rs37) + \left(-\frac{6}{rs37^5} \cdot SC7oo \cdot ac^4 + \frac{1}{rs37^3} \cdot SD7oo \cdot ac^2 \right) \right. \\
& \left. \cdot d3\phi333(rs37) + \left(\frac{15}{rs37^6} \cdot SC7oo \cdot ac^4 - \frac{3}{rs37^4} \cdot SD7oo \cdot ac^2 + \frac{po7}{rs37^2} \right) \right. \\
& \left. \cdot d2\phi333(rs37) + \left(-\frac{15}{rs37^7} \cdot SC7oo \cdot ac^4 + \frac{3}{rs37^5} \cdot SD7oo \cdot ac^2 \right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{po7}{rs37^3} \right) \cdot d1\phi333(rs37) \right) :
\end{aligned}$$

$$\cdot d2\varphi333(rs37) + \left(-\frac{15}{rs37^7} \cdot SC700 \cdot ac^4 + \frac{3}{rs37^5} \cdot SD700 \cdot ac^2 - \frac{po7}{rs37^3} \right) \cdot d1\varphi333(rs37) :$$

$$\begin{aligned} > \varphi_{208} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs38^4} \cdot SC80sr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi331(rs38) + \left(-\frac{6}{rs38^5} \cdot SC80sr \cdot ac^4 + \frac{1}{rs38^3} \cdot SD80sr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi331(rs38) + \left(\frac{15}{rs38^6} \cdot SC80sr \cdot ac^4 - \frac{3}{rs38^4} \cdot SD80sr \cdot ac^2 + \frac{mo8}{rs38^2} \right) \cdot d2\varphi331(rs38) + \left(-\frac{15}{rs38^7} \cdot SC80sr \cdot ac^4 + \frac{3}{rs38^5} \cdot SD80sr \cdot ac^2 - \frac{mo8}{rs38^3} \right) \cdot d1\varphi331(rs38) \right) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs38^4} \cdot SC80ti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi332(rs38) + \left(-\frac{6}{rs38^5} \cdot SC80ti \cdot ac^4 + \frac{1}{rs38^3} \cdot SD80ti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi332(rs38) + \left(\frac{15}{rs38^6} \cdot SC80ti \cdot ac^4 - \frac{3}{rs38^4} \cdot SD80ti \cdot ac^2 + \frac{lo8}{rs38^2} \right) \cdot d2\varphi332(rs38) + \left(-\frac{15}{rs38^7} \cdot SC80ti \cdot ac^4 + \frac{3}{rs38^5} \cdot SD80ti \cdot ac^2 - \frac{lo8}{rs38^3} \right) \cdot d1\varphi332(rs38) \right) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs38^4} \cdot SC800 \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi333(rs38) + \left(-\frac{6}{rs38^5} \cdot SC800 \cdot ac^4 + \frac{1}{rs38^3} \cdot SD800 \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi333(rs38) + \left(\frac{15}{rs38^6} \cdot SC800 \cdot ac^4 - \frac{3}{rs38^4} \cdot SD800 \cdot ac^2 + \frac{po8}{rs38^2} \right) \cdot d2\varphi333(rs38) + \left(-\frac{15}{rs38^7} \cdot SC800 \cdot ac^4 + \frac{3}{rs38^5} \cdot SD800 \cdot ac^2 - \frac{po8}{rs38^3} \right) \cdot d1\varphi333(rs38) \right) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > \varphi_{209} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs39^4} \cdot SC90sr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi331(rs39) + \left(-\frac{6}{rs39^5} \cdot SC90sr \cdot ac^4 + \frac{1}{rs39^3} \cdot SD90sr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi331(rs39) + \left(\frac{15}{rs39^6} \cdot SC90sr \cdot ac^4 - \frac{3}{rs39^4} \cdot SD90sr \cdot ac^2 + \frac{mo9}{rs39^2} \right) \cdot d2\varphi331(rs39) + \left(-\frac{15}{rs39^7} \cdot SC90sr \cdot ac^4 + \frac{3}{rs39^5} \cdot SD90sr \cdot ac^2 - \frac{mo9}{rs39^3} \right) \cdot d1\varphi331(rs39) \right) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs39^4} \cdot SC90ti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi332(rs39) + \left(-\frac{6}{rs39^5} \cdot SC90ti \cdot ac^4 + \frac{1}{rs39^3} \cdot SD90ti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi332(rs39) + \left(\frac{15}{rs39^6} \cdot SC90ti \cdot ac^4 - \frac{3}{rs39^4} \cdot SD90ti \cdot ac^2 + \frac{lo9}{rs39^2} \right) \cdot d2\varphi332(rs39) + \left(-\frac{15}{rs39^7} \cdot SC90ti \cdot ac^4 + \frac{3}{rs39^5} \cdot SD90ti \cdot ac^2 - \frac{lo9}{rs39^3} \right) \cdot d1\varphi332(rs39) \right) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs39^4} \cdot SC900 \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi333(rs39) + \left(-\frac{6}{rs39^5} \cdot SC900 \cdot ac^4 + \frac{1}{rs39^3} \cdot SD900 \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi333(rs39) + \left(\frac{15}{rs39^6} \cdot SC900 \cdot ac^4 - \frac{3}{rs39^4} \cdot SD900 \cdot ac^2 + \frac{po9}{rs39^2} \right) \cdot d2\varphi333(rs39) + \left(-\frac{15}{rs39^7} \cdot SC900 \cdot ac^4 + \frac{3}{rs39^5} \cdot SD900 \cdot ac^2 - \frac{po9}{rs39^3} \right) \cdot d1\varphi333(rs39) \right) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot ac^2 - \frac{lo9}{rs39^3} \Big) \cdot d1\varphi332(rs39) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs39^4} \cdot SC9oo \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\varphi333(rs39) + \left(-\frac{6}{rs39^5} \cdot SC9oo \cdot ac^4 + \frac{1}{rs39^3} \cdot SD9oo \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi333(rs39) + \left(\frac{15}{rs39^6} \cdot SC9oo \cdot ac^4 - \frac{3}{rs39^4} \cdot SD9oo \cdot ac^2 + \frac{po9}{rs39^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi333(rs39) + \left(-\frac{15}{rs39^7} \cdot SC9oo \cdot ac^4 + \frac{3}{rs39^5} \cdot SD9oo \cdot ac^2 \right. \\
& \left. \left. - \frac{po9}{rs39^3} \right) \cdot d1\varphi333(rs39) \right) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varrho_{o10} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs310^4} \cdot SC10osr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi331(rs310) + \left(-\frac{6}{rs310^5} \right. \right. \\
& \cdot SC10osr \cdot ac^4 + \frac{1}{rs310^3} \cdot SD10osr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi331(rs310) + \left(\frac{15}{rs310^6} \right. \\
& \cdot SC10osr \cdot ac^4 - \frac{3}{rs310^4} \cdot SD10osr \cdot ac^2 + \frac{mo10}{rs310^2} \Big) \cdot d2\varphi331(rs310) + \left(\right. \\
& \left. -\frac{15}{rs310^7} \cdot SC10osr \cdot ac^4 + \frac{3}{rs310^5} \cdot SD10osr \cdot ac^2 - \frac{mo10}{rs310^3} \right) \\
& \cdot d1\varphi331(rs310) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs310^4} \cdot SC10oti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi332(rs310) \right. \\
& + \left(-\frac{6}{rs310^5} \cdot SC10oti \cdot ac^4 + \frac{1}{rs310^3} \cdot SD10oti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi332(rs310) \\
& + \left(\frac{15}{rs310^6} \cdot SC10oti \cdot ac^4 - \frac{3}{rs310^4} \cdot SD10oti \cdot ac^2 + \frac{lo10}{rs310^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi332(rs310) + \left(-\frac{15}{rs310^7} \cdot SC10oti \cdot ac^4 + \frac{3}{rs310^5} \cdot SD10oti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. \left. - \frac{lo10}{rs310^3} \right) \cdot d1\varphi332(rs310) \right) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs310^4} \cdot SC10oo \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\varphi333(rs310) + \left(-\frac{6}{rs310^5} \cdot SC10oo \cdot ac^4 + \frac{1}{rs310^3} \cdot SD10oo \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi333(rs310) + \left(\frac{15}{rs310^6} \cdot SC10oo \cdot ac^4 - \frac{3}{rs310^4} \cdot SD10oo \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{po10}{rs310^2} \right) \cdot d2\varphi333(rs310) + \left(-\frac{15}{rs310^7} \cdot SC10oo \cdot ac^4 + \frac{3}{rs310^5} \right. \\
& \left. \left. \cdot SD10oo \cdot ac^2 - \frac{po10}{rs310^3} \right) \cdot d1\varphi333(rs310) \right) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varrho_{o11} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs311^4} \cdot SC11osr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi331(rs311) + \left(-\frac{6}{rs311^5} \right. \right. \\
& \cdot SC11osr \cdot ac^4 + \frac{1}{rs311^3} \cdot SD11osr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi331(rs311) + \left(\frac{15}{rs311^6} \right. \\
& \cdot SC11osr \cdot ac^4 - \frac{3}{rs311^4} \cdot SD11osr \cdot ac^2 + \frac{mo11}{rs311^2} \Big) \cdot d2\varphi331(rs311) + \left(\right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{15}{rs311^7} \cdot SC11osr \cdot ac^4 + \frac{3}{rs311^5} \cdot SD11osr \cdot ac^2 - \frac{mo11}{rs311^3} \\
& \cdot d1\phi331(rs311) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs311^4} \cdot SC11oti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\phi332(rs311) \right. \\
& + \left(-\frac{6}{rs311^5} \cdot SC11oti \cdot ac^4 + \frac{1}{rs311^3} \cdot SD11oti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi332(rs311) \\
& + \left(\frac{15}{rs311^6} \cdot SC11oti \cdot ac^4 - \frac{3}{rs311^4} \cdot SD11oti \cdot ac^2 + \frac{lo11}{rs311^2} \right) \\
& \cdot d2\phi332(rs311) + \left(-\frac{15}{rs311^7} \cdot SC11oti \cdot ac^4 + \frac{3}{rs311^5} \cdot SD11oti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{lo11}{rs311^3} \right) \cdot d1\phi332(rs311) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs311^4} \cdot SC11oo \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\phi333(rs311) + \left(-\frac{6}{rs311^5} \cdot SC11oo \cdot ac^4 + \frac{1}{rs311^3} \cdot SD11oo \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\phi333(rs311) + \left(\frac{15}{rs311^6} \cdot SC11oo \cdot ac^4 - \frac{3}{rs311^4} \cdot SD11oo \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{po11}{rs311^2} \right) \cdot d2\phi333(rs311) + \left(-\frac{15}{rs311^7} \cdot SC11oo \cdot ac^4 + \frac{3}{rs311^5} \right. \\
& \left. \cdot SD11oo \cdot ac^2 - \frac{po11}{rs311^3} \right) \cdot d1\phi333(rs311) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varphi_{o12} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs312^4} \cdot SC12osr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\phi331(rs312) + \left(-\frac{6}{rs312^5} \right. \right. \\
& \cdot SC12osr \cdot ac^4 + \frac{1}{rs312^3} \cdot SD12osr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\phi331(rs312) + \left(\frac{15}{rs312^6} \right. \\
& \cdot SC12osr \cdot ac^4 - \frac{3}{rs312^4} \cdot SD12osr \cdot ac^2 + \frac{mo12}{rs312^2} \Big) \cdot d2\phi331(rs312) + \left(\right. \\
& \left. -\frac{15}{rs312^7} \cdot SC12osr \cdot ac^4 + \frac{3}{rs312^5} \cdot SD12osr \cdot ac^2 - \frac{mo12}{rs312^3} \right) \\
& \cdot d1\phi331(rs312) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs312^4} \cdot SC12oti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\phi332(rs312) \right. \\
& + \left(-\frac{6}{rs312^5} \cdot SC12oti \cdot ac^4 + \frac{1}{rs312^3} \cdot SD12oti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi332(rs312) \\
& + \left(\frac{15}{rs312^6} \cdot SC12oti \cdot ac^4 - \frac{3}{rs312^4} \cdot SD12oti \cdot ac^2 + \frac{lo12}{rs312^2} \right) \\
& \cdot d2\phi332(rs312) + \left(-\frac{15}{rs312^7} \cdot SC12oti \cdot ac^4 + \frac{3}{rs312^5} \cdot SD12oti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{lo12}{rs312^3} \right) \cdot d1\phi332(rs312) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs312^4} \cdot SC12oo \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\phi333(rs312) + \left(-\frac{6}{rs312^5} \cdot SC12oo \cdot ac^4 + \frac{1}{rs312^3} \cdot SD12oo \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\phi333(rs312) + \left(\frac{15}{rs312^6} \cdot SC12oo \cdot ac^4 - \frac{3}{rs312^4} \cdot SD12oo \cdot ac^2 \right.
\end{aligned}$$

$$+ \frac{po12}{rs312^2} \Big) \cdot d2\varphi333(rs312) + \left(-\frac{15}{rs312^7} \cdot SC12oo \cdot ac^4 + \frac{3}{rs312^5} \cdot SD12oo \cdot ac^2 - \frac{po12}{rs312^3} \right) \cdot d1\varphi333(rs312) \Big) :$$

$$\begin{aligned} > \varphi_{o13} := \frac{6}{48} \Big(\left(\frac{1}{rs313^4} \cdot SC13osr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi331(rs313) + \left(-\frac{6}{rs313^5} \cdot SC13osr \cdot ac^4 + \frac{1}{rs313^3} \cdot SD13osr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi331(rs313) + \left(\frac{15}{rs313^6} \cdot SC13osr \cdot ac^4 - \frac{3}{rs313^4} \cdot SD13osr \cdot ac^2 + \frac{mo13}{rs313^2} \right) \cdot d2\varphi331(rs313) + \left(-\frac{15}{rs313^7} \cdot SC13osr \cdot ac^4 + \frac{3}{rs313^5} \cdot SD13osr \cdot ac^2 - \frac{mo13}{rs313^3} \right) \cdot d1\varphi331(rs313) \Big) + \frac{6}{48} \Big(\left(\frac{1}{rs313^4} \cdot SC13oti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi332(rs313) + \left(-\frac{6}{rs313^5} \cdot SC13oti \cdot ac^4 + \frac{1}{rs313^3} \cdot SD13oti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi332(rs313) + \left(\frac{15}{rs313^6} \cdot SC13oti \cdot ac^4 - \frac{3}{rs313^4} \cdot SD13oti \cdot ac^2 + \frac{lo13}{rs313^2} \right) \cdot d2\varphi332(rs313) + \left(-\frac{15}{rs313^7} \cdot SC13oti \cdot ac^4 + \frac{3}{rs313^5} \cdot SD13oti \cdot ac^2 - \frac{lo13}{rs313^3} \right) \cdot d1\varphi332(rs313) \Big) + \frac{6}{48} \Big(\left(\frac{1}{rs313^4} \cdot SC13oo \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi333(rs313) + \left(-\frac{6}{rs313^5} \cdot SC13oo \cdot ac^4 + \frac{1}{rs313^3} \cdot SD13oo \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi333(rs313) + \left(\frac{15}{rs313^6} \cdot SC13oo \cdot ac^4 - \frac{3}{rs313^4} \cdot SD13oo \cdot ac^2 + \frac{po13}{rs313^2} \right) \cdot d2\varphi333(rs313) + \left(-\frac{15}{rs313^7} \cdot SC13oo \cdot ac^4 + \frac{3}{rs313^5} \cdot SD13oo \cdot ac^2 - \frac{po13}{rs313^3} \right) \cdot d1\varphi333(rs313) \Big) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > \varphi_{o14} := \frac{6}{48} \Big(\left(\frac{1}{rs314^4} \cdot SC14osr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi331(rs314) + \left(-\frac{6}{rs314^5} \cdot SC14osr \cdot ac^4 + \frac{1}{rs314^3} \cdot SD14osr \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi331(rs314) + \left(\frac{15}{rs314^6} \cdot SC14osr \cdot ac^4 - \frac{3}{rs314^4} \cdot SD14osr \cdot ac^2 + \frac{mo14}{rs314^2} \right) \cdot d2\varphi331(rs314) + \left(-\frac{15}{rs314^7} \cdot SC14osr \cdot ac^4 + \frac{3}{rs314^5} \cdot SD14osr \cdot ac^2 - \frac{mo14}{rs314^3} \right) \cdot d1\varphi331(rs314) \Big) + \frac{6}{48} \Big(\left(\frac{1}{rs314^4} \cdot SC14oti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi332(rs314) + \left(-\frac{6}{rs314^5} \cdot SC14oti \cdot ac^4 + \frac{1}{rs314^3} \cdot SD14oti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi332(rs314) \Big) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left(\frac{15}{rs314^6} \cdot SC14oti \cdot ac^4 - \frac{3}{rs314^4} \cdot SD14oti \cdot ac^2 + \frac{lo14}{rs314^2} \right) \\
& \cdot d2\phi332(rs314) + \left(-\frac{15}{rs314^7} \cdot SC14oti \cdot ac^4 + \frac{3}{rs314^5} \cdot SD14oti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{lo14}{rs314^3} \right) \cdot d1\phi332(rs314) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs314^4} \cdot SC14oo \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\phi333(rs314) + \left(-\frac{6}{rs314^5} \cdot SC14oo \cdot ac^4 + \frac{1}{rs314^3} \cdot SD14oo \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\phi333(rs314) + \left(\frac{15}{rs314^6} \cdot SC14oo \cdot ac^4 - \frac{3}{rs314^4} \cdot SD14oo \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{po14}{rs314^2} \right) \cdot d2\phi333(rs314) + \left(-\frac{15}{rs314^7} \cdot SC14oo \cdot ac^4 + \frac{3}{rs314^5} \right. \\
& \left. \cdot SD14oo \cdot ac^2 - \frac{po14}{rs314^3} \right) \cdot d1\phi333(rs314) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varrho_{o15} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs315^4} \cdot SC15osr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\phi331(rs315) + \left(-\frac{6}{rs315^5} \right. \right. \\
& \cdot SC15osr \cdot ac^4 + \frac{1}{rs315^3} \cdot SD15osr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\phi331(rs315) + \left(\frac{15}{rs315^6} \right. \\
& \cdot SC15osr \cdot ac^4 - \frac{3}{rs315^4} \cdot SD15osr \cdot ac^2 + \frac{mo15}{rs315^2} \Big) \cdot d2\phi331(rs315) + \left(\right. \\
& \left. -\frac{15}{rs315^7} \cdot SC15osr \cdot ac^4 + \frac{3}{rs315^5} \cdot SD15osr \cdot ac^2 - \frac{mo15}{rs315^3} \right) \\
& \cdot d1\phi331(rs315) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs315^4} \cdot SC15oti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\phi332(rs315) \right. \\
& + \left(-\frac{6}{rs315^5} \cdot SC15oti \cdot ac^4 + \frac{1}{rs315^3} \cdot SD15oti \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\phi332(rs315) \right. \\
& + \left(\frac{15}{rs315^6} \cdot SC15oti \cdot ac^4 - \frac{3}{rs315^4} \cdot SD15oti \cdot ac^2 + \frac{lo15}{rs315^2} \right) \\
& \cdot d2\phi332(rs315) + \left(-\frac{15}{rs315^7} \cdot SC15oti \cdot ac^4 + \frac{3}{rs315^5} \cdot SD15oti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{lo15}{rs315^3} \right) \cdot d1\phi332(rs315) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs315^4} \cdot SC15oo \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\phi333(rs315) + \left(-\frac{6}{rs315^5} \cdot SC15oo \cdot ac^4 + \frac{1}{rs315^3} \cdot SD15oo \cdot ac^2 \Big) \\
& \cdot d3\phi333(rs315) + \left(\frac{15}{rs315^6} \cdot SC15oo \cdot ac^4 - \frac{3}{rs315^4} \cdot SD15oo \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{po15}{rs315^2} \right) \cdot d2\phi333(rs315) + \left(-\frac{15}{rs315^7} \cdot SC15oo \cdot ac^4 + \frac{3}{rs315^5} \right. \\
& \left. \cdot SD15oo \cdot ac^2 - \frac{po15}{rs315^3} \right) \cdot d1\phi333(rs315) \Big) :
\end{aligned}$$

$$> \varrho_{o16} := \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs316^4} \cdot SC16osr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\phi331(rs316) + \left(-\frac{6}{rs316^5} \right. \right.$$

$$\begin{aligned}
& \cdot SC16osr \cdot ac^4 + \frac{1}{rs316^3} \cdot SD16osr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi331(rs316) + \left(\frac{15}{rs316^6} \right. \\
& \cdot SC16osr \cdot ac^4 - \frac{3}{rs316^4} \cdot SD16osr \cdot ac^2 + \frac{mo16}{rs316^2} \Big) \cdot d2\varphi331(rs316) + \left(\right. \\
& \left. - \frac{15}{rs316^7} \cdot SC16osr \cdot ac^4 + \frac{3}{rs316^5} \cdot SD16osr \cdot ac^2 - \frac{mo16}{rs316^3} \right) \\
& \cdot d1\varphi331(rs316) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs316^4} \cdot SC16oti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi332(rs316) \right. \\
& + \left(- \frac{6}{rs316^5} \cdot SC16oti \cdot ac^4 + \frac{1}{rs316^3} \cdot SD16oti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi332(rs316) \\
& + \left(\frac{15}{rs316^6} \cdot SC16oti \cdot ac^4 - \frac{3}{rs316^4} \cdot SD16oti \cdot ac^2 + \frac{lo16}{rs316^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi332(rs316) + \left(- \frac{15}{rs316^7} \cdot SC16oti \cdot ac^4 + \frac{3}{rs316^5} \cdot SD16oti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{lo16}{rs316^3} \right) \cdot d1\varphi332(rs316) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs316^4} \cdot SC16oo \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\varphi333(rs316) + \left(- \frac{6}{rs316^5} \cdot SC16oo \cdot ac^4 + \frac{1}{rs316^3} \cdot SD16oo \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\varphi333(rs316) + \left(\frac{15}{rs316^6} \cdot SC16oo \cdot ac^4 - \frac{3}{rs316^4} \cdot SD16oo \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{po16}{rs316^2} \right) \cdot d2\varphi333(rs316) + \left(- \frac{15}{rs316^7} \cdot SC16oo \cdot ac^4 + \frac{3}{rs316^5} \right. \\
& \left. \cdot SD16oo \cdot ac^2 - \frac{po16}{rs316^3} \right) \cdot d1\varphi333(rs316) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> \varrho_{o17} := & \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs317^4} \cdot SC17osr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi331(rs317) + \left(- \frac{6}{rs317^5} \right. \right. \\
& \cdot SC17osr \cdot ac^4 + \frac{1}{rs317^3} \cdot SD17osr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\varphi331(rs317) + \left(\frac{15}{rs317^6} \right. \\
& \cdot SC17osr \cdot ac^4 - \frac{3}{rs317^4} \cdot SD17osr \cdot ac^2 + \frac{mo17}{rs317^2} \Big) \cdot d2\varphi331(rs317) + \left(\right. \\
& \left. - \frac{15}{rs317^7} \cdot SC17osr \cdot ac^4 + \frac{3}{rs317^5} \cdot SD17osr \cdot ac^2 - \frac{mo17}{rs317^3} \right) \\
& \cdot d1\varphi331(rs317) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs317^4} \cdot SC17oti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\varphi332(rs317) \right. \\
& + \left(- \frac{6}{rs317^5} \cdot SC17oti \cdot ac^4 + \frac{1}{rs317^3} \cdot SD17oti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\varphi332(rs317) \\
& + \left(\frac{15}{rs317^6} \cdot SC17oti \cdot ac^4 - \frac{3}{rs317^4} \cdot SD17oti \cdot ac^2 + \frac{lo17}{rs317^2} \right) \\
& \cdot d2\varphi332(rs317) + \left(- \frac{15}{rs317^7} \cdot SC17oti \cdot ac^4 + \frac{3}{rs317^5} \cdot SD17oti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{lo17}{rs317^3} \right) \cdot d1\varphi332(rs317) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs317^4} \cdot SC17oo \cdot ac^4 \right) \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \cdot d4\phi333(rs317) + \left(-\frac{6}{rs317^5} \cdot SC1700 \cdot ac^4 + \frac{1}{rs317^3} \cdot SD1700 \cdot ac^2 \right) \\ & \cdot d3\phi333(rs317) + \left(\frac{15}{rs317^6} \cdot SC1700 \cdot ac^4 - \frac{3}{rs317^4} \cdot SD1700 \cdot ac^2 \right. \\ & \left. + \frac{po17}{rs317^2} \right) \cdot d2\phi333(rs317) + \left(-\frac{15}{rs317^7} \cdot SC1700 \cdot ac^4 + \frac{3}{rs317^5} \right. \\ & \left. \cdot SD1700 \cdot ac^2 - \frac{po17}{rs317^3} \right) \cdot d1\phi333(rs317) \Big) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > \varphi_{o18} := \frac{6}{48} \Big(\left(\frac{1}{rs318^4} \cdot SC180sr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\phi331(rs318) + \left(-\frac{6}{rs318^5} \right. \\ & \cdot SC180sr \cdot ac^4 + \frac{1}{rs318^3} \cdot SD180sr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\phi331(rs318) + \left(\frac{15}{rs318^6} \right. \\ & \cdot SC180sr \cdot ac^4 - \frac{3}{rs318^4} \cdot SD180sr \cdot ac^2 + \frac{mo18}{rs318^2} \Big) \cdot d2\phi331(rs318) + \left(\right. \\ & \left. -\frac{15}{rs318^7} \cdot SC180sr \cdot ac^4 + \frac{3}{rs318^5} \cdot SD180sr \cdot ac^2 - \frac{mo18}{rs318^3} \right) \\ & \cdot d1\phi331(rs318) \Big) + \frac{6}{48} \Big(\left(\frac{1}{rs318^4} \cdot SC180ti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\phi332(rs318) \\ & + \left(-\frac{6}{rs318^5} \cdot SC180ti \cdot ac^4 + \frac{1}{rs318^3} \cdot SD180ti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi332(rs318) \\ & + \left(\frac{15}{rs318^6} \cdot SC180ti \cdot ac^4 - \frac{3}{rs318^4} \cdot SD180ti \cdot ac^2 + \frac{lo18}{rs318^2} \right) \\ & \cdot d2\phi332(rs318) + \left(-\frac{15}{rs318^7} \cdot SC180ti \cdot ac^4 + \frac{3}{rs318^5} \cdot SD180ti \cdot ac^2 \right. \\ & \left. - \frac{lo18}{rs318^3} \right) \cdot d1\phi332(rs318) \Big) + \frac{6}{48} \Big(\left(\frac{1}{rs318^4} \cdot SC180o \cdot ac^4 \right) \\ & \cdot d4\phi333(rs318) + \left(-\frac{6}{rs318^5} \cdot SC180o \cdot ac^4 + \frac{1}{rs318^3} \cdot SD180o \cdot ac^2 \right) \\ & \cdot d3\phi333(rs318) + \left(\frac{15}{rs318^6} \cdot SC180o \cdot ac^4 - \frac{3}{rs318^4} \cdot SD180o \cdot ac^2 \right. \\ & \left. + \frac{po18}{rs318^2} \right) \cdot d2\phi333(rs318) + \left(-\frac{15}{rs318^7} \cdot SC180o \cdot ac^4 + \frac{3}{rs318^5} \right. \\ & \left. \cdot SD180o \cdot ac^2 - \frac{po18}{rs318^3} \right) \cdot d1\phi333(rs318) \Big) : \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} > \varphi_{o19} := \frac{6}{48} \Big(\left(\frac{1}{rs319^4} \cdot SC190sr \cdot ac^4 \right) \cdot d4\phi331(rs319) + \left(-\frac{6}{rs319^5} \right. \\ & \cdot SC190sr \cdot ac^4 + \frac{1}{rs319^3} \cdot SD190sr \cdot ac^2 \Big) \cdot d3\phi331(rs319) + \left(\frac{15}{rs319^6} \right. \\ & \cdot SC190sr \cdot ac^4 - \frac{3}{rs319^4} \cdot SD190sr \cdot ac^2 + \frac{mo19}{rs319^2} \Big) \cdot d2\phi331(rs319) + \left(\right. \\ & \left. -\frac{15}{rs319^7} \cdot SC190sr \cdot ac^4 + \frac{3}{rs319^5} \cdot SD190sr \cdot ac^2 - \frac{mo19}{rs319^3} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot d1\phi331(rs319) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs319^4} \cdot SC19oti \cdot ac^4 \right) \cdot d4\phi332(rs319) \right. \\
& + \left(-\frac{6}{rs319^5} \cdot SC19oti \cdot ac^4 + \frac{1}{rs319^3} \cdot SD19oti \cdot ac^2 \right) \cdot d3\phi332(rs319) \\
& + \left(\frac{15}{rs319^6} \cdot SC19oti \cdot ac^4 - \frac{3}{rs319^4} \cdot SD19oti \cdot ac^2 + \frac{lo19}{rs319^2} \right) \\
& \cdot d2\phi332(rs319) + \left(-\frac{15}{rs319^7} \cdot SC19oti \cdot ac^4 + \frac{3}{rs319^5} \cdot SD19oti \cdot ac^2 \right. \\
& \left. - \frac{lo19}{rs319^3} \right) \cdot d1\phi332(rs319) \Big) + \frac{6}{48} \left(\left(\frac{1}{rs319^4} \cdot SC19oo \cdot ac^4 \right) \right. \\
& \cdot d4\phi333(rs319) + \left(-\frac{6}{rs319^5} \cdot SC19oo \cdot ac^4 + \frac{1}{rs319^3} \cdot SD19oo \cdot ac^2 \right) \\
& \cdot d3\phi333(rs319) + \left(\frac{15}{rs319^6} \cdot SC19oo \cdot ac^4 - \frac{3}{rs319^4} \cdot SD19oo \cdot ac^2 \right. \\
& \left. + \frac{po19}{rs319^2} \right) \cdot d2\phi333(rs319) + \left(-\frac{15}{rs319^7} \cdot SC19oo \cdot ac^4 + \frac{3}{rs319^5} \right. \\
& \left. \cdot SD19oo \cdot ac^2 - \frac{po19}{rs319^3} \right) \cdot d1\phi333(rs319) \Big) :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\gamma_o & := \gamma_{o1} + \gamma_{o2} + \gamma_{o3} + \gamma_{o4} + \gamma_{o5} + \gamma_{o6} + \gamma_{o7} + \gamma_{o8} + \gamma_{o9} \\
& + \gamma_{o10} + \gamma_{o11} + \gamma_{o12} + \gamma_{o13} + \gamma_{o14} + \gamma_{o15} + \gamma_{o16} + \gamma_{o17} \\
& + \gamma_{o18} + \gamma_{o19} :
\end{aligned}$$

#Calculating the parameter gamma γ

$$\begin{aligned}
\gamma_{sr} & := 4 \cdot (\gamma_{lsr} + \gamma_{2sr}) : \\
\gamma_{ti} & := 4 \cdot (\gamma_{lti} + \gamma_{2ti}) : \\
\gamma_o & := 4 \cdot (\gamma_{lo} + \gamma_{2o}) :
\end{aligned}$$

#Parameters for A

$$\begin{aligned}
x & := \frac{hp \cdot \omega}{2 \cdot \theta} : \\
a1 & := 1 + \frac{x \cdot \coth(x)}{2} : \\
a2 & := \frac{13}{3} + \frac{47}{6} \cdot x \cdot \coth(x) + \frac{23}{6} \cdot x^2 \cdot (\coth(x))^2 : \\
a3 & := \frac{-25}{3} - \frac{121}{6} \cdot x \cdot \coth(x) - \frac{50}{3} \cdot x^2 \cdot (\coth(x))^2 - \frac{16}{3} \cdot x^3 \\
& \cdot (\coth(x))^3 - \frac{1}{2} \cdot x^4 \cdot (\coth(x))^4 :
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
> a4 &:= \frac{43}{3} + \frac{93}{2} \cdot x \cdot \coth(x) + \frac{169}{3} \cdot x^2 \cdot (\coth(x))^2 + \frac{83}{3} \cdot x^3 \\
&\quad \cdot (\coth(x))^3 + \frac{22}{3} \cdot x^4 \cdot (\coth(x))^4 + \frac{1}{2} \cdot x^5 \cdot (\coth(x))^5 : \\
> a5 &:= -\frac{105}{3} - \frac{749}{6} \cdot x \cdot \coth(x) - \frac{363}{2} \cdot x^2 \cdot (\coth(x))^2 - \frac{391}{3} \cdot x^3 \\
&\quad \cdot (\coth(x))^3 - \frac{148}{3} \cdot x^4 \cdot (\coth(x))^4 - \frac{53}{6} \cdot x^5 \cdot (\coth(x))^5 - \frac{1}{2} \cdot x^6 \\
&\quad \cdot (\coth(x))^6 : \\
> a6 &:= 65 + \frac{561}{2} \cdot x \cdot \coth(x) + \frac{1489}{3} \cdot x^2 \cdot (\coth(x))^2 + \frac{927}{2} \cdot x^3 \\
&\quad \cdot (\coth(x))^3 + \frac{733}{3} \cdot x^4 \cdot (\coth(x))^4 + \frac{145}{2} \cdot x^5 \cdot (\coth(x))^5 + \frac{31}{3} \\
&\quad \cdot x^6 \cdot (\coth(x))^6 + \frac{1}{2} \cdot x^7 \cdot (\coth(x))^7 :
\end{aligned}$$

Formular of A

$$\begin{aligned}
> A &:= a1 + \gamma^2 \cdot \frac{\theta^2}{K^4} \cdot a2 + \gamma^3 \cdot \frac{\theta^3}{K^6} \cdot a3 + \gamma^4 \cdot \frac{\theta^4}{K^8} \cdot a4 + \gamma^5 \cdot \frac{\theta^5}{K^{10}} \cdot a5 \\
&\quad + \frac{\gamma^6 \cdot \theta^6}{K^{12}} \cdot a6 : fA := unapply(A, K, \omega, \gamma, \theta, hp) :
\end{aligned}$$

$$> dA := diff(A, \theta) : fdA := unapply(dA, K, \omega, \gamma, \theta, hp) :$$

#Atomic displacement yo

$$> yo := sqrt\left(\frac{2 \cdot \gamma \cdot \theta^2 \cdot A}{3 \cdot K^3}\right) : fyo := unapply(yo, K, \omega, \gamma, \theta, hp) :$$

Formular for calculating linear thermal coefficent

$$\begin{aligned}
> nodai &:= \frac{yop \cdot kb}{(a \cdot \theta)} \cdot \left(1 + \frac{\theta}{2} \cdot \frac{dAp}{Ap}\right) : \\
> foT &:= unapply(nodai, yop, \theta, Ap, dAp) :
\end{aligned}$$

#Formular for calculating Cv

$$\begin{aligned}
> xcv &:= \frac{h \cdot wcv}{2 \cdot \theta cv} : tamecv := 3 \cdot kb \cdot \left(\frac{(xcv)^2}{(\sinh(xcv))^2} + \frac{2 \cdot \theta cv}{kcv^2} \cdot \left(\left(2 \cdot \gamma_{2cv} \right. \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \left. + \frac{\gamma_{1cv}}{3} \right) \cdot \left(\frac{(xcv)^3 \cdot \coth(xcv)}{(\sinh(xcv))^2} \right) + \frac{\gamma_{1cv}}{3} \cdot \left(1 + \frac{(xcv)^2}{(\sinh(xcv))^2} \right) - \gamma_{2cv} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \cdot \left(\frac{xcv^4}{(\sinh(xcv))^4} + \frac{2 \cdot xcv^4 \cdot (\coth(xcv))^2}{(\sinh(xcv))^2} \right) \right) \right) : fcv := unapply(tamecv,
\end{aligned}$$

LL $\theta_{cv}, w_{cv}, k_{cv}, \gamma_{1cv}, \gamma_{2cv}$:

$$\left[\begin{array}{l} > x_{sr} := \frac{h \cdot \omega_{sr}}{2 \cdot \theta} : x_{ti} := \frac{h \cdot \omega_{ti}}{2 \cdot \theta} : x_o := \frac{h \cdot \omega_o}{2 \cdot \theta} : \end{array} \right.$$

$$\left[\begin{array}{l} > d_{2nlt dsr} := 3 \cdot \left(\frac{1}{3} \cdot d_{2u0sr} + \theta \cdot \left(x_{sr} \cdot \frac{\coth(x_{sr})}{2 \cdot k_{sr}} \cdot d_{2k_{sr}} - \frac{1}{4 \cdot k_{sr}^2} \right. \right. \\ \cdot (d_{1k_{sr}})^2 \cdot \left. \left. \left(x_{sr} \cdot \coth(x_{sr}) + \frac{x_{sr}^2}{(\sinh(x_{sr}))^2} \right) \right) \right) : d_{2nlt dti} := 3 \cdot \left(\frac{1}{3} \right. \\ \cdot d_{2u0ti} + \theta \cdot \left(x_{ti} \cdot \frac{\coth(x_{ti})}{2 \cdot k_{ti}} \cdot d_{2k_{ti}} - \frac{1}{4 \cdot k_{ti}^2} \cdot (d_{1k_{ti}})^2 \cdot \left(x_{ti} \right. \right. \\ \cdot \coth(x_{ti}) + \frac{x_{ti}^2}{(\sinh(x_{ti}))^2} \right) \left. \left. \right) \right) : d_{2nlt do} := 3 \cdot \left(\frac{1}{3} \cdot d_{2u0o} + \theta \cdot \left(x_o \right. \right. \\ \cdot \frac{\coth(x_o)}{2 \cdot k_o} \cdot d_{2k_o} - \frac{1}{4 \cdot k_o^2} \cdot (d_{1k_o})^2 \cdot \left(x_o \cdot \coth(x_o) \right. \\ \left. \left. \left. \left. + \frac{x_o^2}{(\sinh(x_o))^2} \right) \right) \right) \right) : \end{array} \right.$$

#Nearest neighbour distance **a**:

$$\left[\begin{array}{l} > a := r_{11} : \end{array} \right.$$

$$\left[\begin{array}{l} > k_{srso} := evalf(k_{sr}) : k_{tiso} := evalf(k_{ti}) : k_{oso} := evalf(k_o) : \end{array} \right.$$

ω

$$\left[\begin{array}{l} > \omega_{srso} := evalf(\omega_{sr}) : \omega_{tiso} := evalf(\omega_{ti}) : \omega_{oso} := evalf(\omega_o) : \end{array} \right.$$

>
>
>

γ_1

$$\left[\begin{array}{l} > \gamma_{1srso} := evalf(\gamma_{1sr}) : \gamma_{1tiso} := evalf(\gamma_{1ti}) : \gamma_{1oso} := evalf(\gamma_{1o}) : \end{array} \right.$$

γ_2

$$\left[\begin{array}{l} > \gamma_{2srso} := evalf(\gamma_{2sr}) : \gamma_{2tiso} := evalf(\gamma_{2ti}) : \gamma_{2oso} := evalf(\gamma_{2o}) : \end{array} \right.$$

```

#  $\gamma$ 
[ >  $\gamma_{rsro} := 4 \cdot (\gamma_{lsro} + \gamma_{2sro}) : \gamma_{tiso} := 4 \cdot (\gamma_{ltiso} + \gamma_{2tiso}) : \gamma_{oso} := 4$ 
     $\cdot (\gamma_{loso} + \gamma_{2oso}) :$ 

[ >  $Asrso := evalf(fA(ksrso, \omega_{rsro}, \gamma_{rsro}, \theta, h)) : Atiso := evalf(fA(ktiso,$ 
     $\omega_{tiso}, \gamma_{tiso}, \theta, h)) : Aoso := evalf(fA(koso, \omega_{oso}, \gamma_{oso}, \theta, h)) :$ 

[ >  $dAsrso := fdA(ksrso, \omega_{rsro}, \gamma_{rsro}, \theta, h) : dAtiso := fdA(ktiso, \omega_{tiso}, \gamma_{tiso},$ 
     $\theta, h) : dAoso := fdA(koso, \omega_{oso}, \gamma_{oso}, \theta, h) :$ 

[ >  $yosrso := evalf(fyo(ksrso, \omega_{rsro}, \gamma_{rsro}, \theta, h)) : yotiso := evalf(fyo(ktiso,$ 
     $\omega_{tiso}, \gamma_{tiso}, \theta, h)) : yooso := evalf(fyo(koso, \omega_{oso}, \gamma_{oso}, \theta, h)) :$ 

```

Calculating atomic displacement y_o and linear thermal coefficient

```

[ >  $T1 := 298 : T2 := 2290 : stepT := 83 : Knhiet := \frac{(T2 - T1)}{stepT} : NhietdoT :=$ 
     $array(1 .. (Knhiet + 1)) :$ 

#  $y_o$ 
[ >  $r1T := array(1 .. (Knhiet + 1)) : acT := array(1 .. (Knhiet + 1)) : yosto$ 
     $:= array(1 .. (Knhiet + 1)) :$ 
[ > for i from 1 by 1 to (Knhiet + 1) do
     $\theta := kb \cdot (T1 + stepT \cdot (i - 1)) : dichuyenSr := evalf(yosrso) ; dichuyenTi$ 
     $:= evalf(yotiso) ; dichuyenO := evalf(yooso) ; yosto[i] := evalf(nsr$ 
     $\cdot dichuyenSr + nti \cdot dichuyenTi + no \cdot dichuyenO) ; r1T[i] := a + yosto[i] ;$ 
     $acT[i] := 2 \cdot r1T[i] ;$ 
end do:

# Linear thermal coefficient
[ >  $\alpha_{Tsr} := array(1 .. (Knhiet + 1)) : \alpha_{Tti} := array(1 .. (Knhiet + 1)) : \alpha_{To}$ 
     $:= array(1 .. (Knhiet + 1)) : \alpha_{Tsto} := array(1 .. (Knhiet + 1)) :$ 
[ >  $\theta := ' \theta ' :$ 
[ > for i from 1 by 1 to (Knhiet + 1) do
     $\theta := kb \cdot (T1 + stepT \cdot (i - 1)) : \alpha_{Tsr}[i] := evalf(f\alpha T(yosrso, \theta, Asrso,$ 
     $dAsrso)) ; \alpha_{Tti}[i] := evalf(f\alpha T(yotiso, \theta, Atiso, dAtiso)) ; \alpha_{To}[i]$ 
     $:= evalf(f\alpha T(yooso, \theta, Aoso, dAoso)) ; \alpha_{Tsto}[i] := nsr \cdot \alpha_{Tsr}[i] + nti$ 
     $\cdot \alpha_{Tti}[i] + no \cdot \alpha_{To}[i] ;$ 
end do :
```

Cv

```
[> cvsr := array(1..(Knhiet + 1)) : cvti := array(1..(Knhiet + 1)) : cvo
:= array(1..(Knhiet + 1)) : cvsto := array(1..(Knhiet + 1)) :
cvmolsto := array(1..(Knhiet + 1)) :
> θ := 'θ':
> for i from 1 by 1 to (Knhiet + 1) do
θ := kb · (Tl + stepT · (i - 1)) : cvsr[i] := fcv(θ, ωsrso, ksrso, γ1srso,
γ2srso) : cvti[i] := fcv(θ, ωtiso, ktiso, γ1tiso, γ2tiso) :
cvo[i] := fcv(θ, ωoso, koso, γ1oso, γ2oso) : cvsto[i] := nsr · cvsr[i] + nti
· cvti[i] + no · cvo[i] : cvmolsto[i] := cvsto[i] · Na :
end do:
```

#Numerical calculation of Kapa for SrTiO3: kapasto.

```
[> kapasto := array(1..(Knhiet + 1)) : d2nltdsto := array(1..(Knhiet + 1)) :
> θ := 'θ':
> for i from 1 by 1 to (Knhiet + 1) do
θ := kb · (Tl + stepT · (i - 1)) : d2nltdsto[i] := evalf(nsr · d2nltdsr + nti
· d2nltdti + no · d2nltdo) : kapasto[i]
:= evalf  $\left( \frac{3 \cdot \left( \frac{r1T[i]}{a} \right)^3}{\frac{5}{(24 \cdot r1T[i])} \cdot d2nltdsto[i]} \right)$  :
end do:
```

#Cp

```
[> cpsto := array(1..(Knhiet + 1)) : cpmolsto := array(1..(Knhiet + 1)) :
> θ := 'θ':
> for i from 1 by 1 to (Knhiet + 1) do
θ := kb · (Tl + stepT · (i - 1)) : cpsto[i] := evalf  $\left( \begin{aligned} &cvsto[i] \\ &+ \frac{\left( 9 \cdot \theta \cdot \left( \frac{8}{5} \right) \cdot (r1T[i])^3 \cdot (\alpha Tsto[i])^2 \right)}{(kb \cdot kapasto[i])} \end{aligned} \right)$  : cpmolsto[i] := cpsto[i] · Na :
end do:
```