

УДК 544.272

ЛОКАЛЬНАЯ СТРУКТУРА РАСПЛАВА ФТОРИДА ЛИТИЯ. II. РАСЧЕТ СТРУКТУРНЫХ ФАКТОРОВ МЕТОДАМИ *ab initio* И КЛАССИЧЕСКОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

© 2022 г. М. А. Кобелев^{a, *}, Д. О. Закирьянов^a, Н. К. Ткачев^a^aИнститут высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: m.kobelev@ihte.uran.ru

Поступила в редакцию 05.07.2022 г.

После доработки 22.07.2022 г.

Принята к публикации 26.07.2022 г.

Проведены расчеты парциальных структурных факторов расплава фторида лития, находящегося при температуре 1200 К тремя методами: *ab initio* и классической молекулярной динамики, а также в рамках модели заряженных твердых сфер в средне-сферическом приближении. Показано, что несмотря на общую топологию рассчитанных парциальных структурных факторов для всех трех методов, ключевой особенностью результатов компьютерного моделирования является отсутствие плеча на правой стороне первого пика катион-катионного структурного фактора. Высказано предположение, что наблюдаемое различие можно связать с мягкостью отталкивательной ветви парного потенциала по Букингеми в случае классической модели при молекулярно-динамическом расчете. Вычисления, проведенные с помощью первопринципной молекулярной динамики, также подтверждают это заключение. Результаты расчета структурного фактора плотность–плотность методами компьютерного моделирования демонстрируют наличие двух максимумов, лежащих при $k \approx 2.4$ и $k \approx 4.4 \text{ \AA}^{-1}$, соответственно. В то же время, в рамках модели заряженных твердых сфер наблюдается один максимум при $k \approx 3.5 \text{ \AA}^{-1}$ и небольшое плечо слева, положение которого совпадает с первым максимумом, полученным методами компьютерного моделирования. Наблюдаемые различия можно связать с тем, что рассчитанная кривая парциального структурного фактора катион–анион в рамках модели заряженных твердых сфер имеет более высокую амплитуду в окрестности волнового вектора $\approx 3.5 \text{ \AA}^{-1}$.

Ключевые слова: структурные факторы, расплав фторида лития, молекулярная динамика, теория функционала плотности

DOI: 10.31857/S0235010622060068

ВВЕДЕНИЕ

К настоящему времени в литературе отсутствуют экспериментальные данные по парциальным структурным факторам (ПСФ) для расплава фторида лития, что связано со слишком короткоживущим набором изотопов фтора в этом случае. В работе Абрамо и др. [1] было проведено сопоставление экспериментальных данных по интенсивности упругой дифракции рентгеновских лучей с предсказаниями модели заряженных твердых сфер с предварительно определенными по плотности и сжимаемости значениями ионных радиусов катиона лития и аниона фтора с парциальными структурными факторами. В целом, для всех галогенидов щелочных металлов (ГЩМ) было показано, что основные особенности дифрактограмм упругого рассеяния рентгеновских лучей или тепловых нейтронов хорошо описываются такой максимально упрощенной

моделью межйонных взаимодействий. Кроме того, было высказано общее предположение, что плечо в окрестности первого пика, описывающего спектральную плотность вероятности распределения катионной пары (в случае его меньшего радиуса по отношению к аниону) или, наоборот, анионной (в случае его большего размера), следует связывать именно с различием ионных диаметров. Поскольку полный массив экспериментальных данных по парциальным структурным факторам ГЦМ так и не удалось накопить к настоящему времени, то вопрос о характерных особенностях типа упомянутого плеча в большой степени так и не решен. Более того, в последующих работах по классической молекулярной динамике с потенциалами типа Борна–Хаггинса–Майера (БХМ) [2] такие особенности не наблюдались. Нам не известны другие работы, где бы обсуждалась локальная структура фторида лития с позиций структурных факторов, особенно при сопоставлении результатов различных моделей межйонного взаимодействия.

В первой нашей работе, посвященной локальной структуре фторида лития были представлены результаты расчетов бинарных (радиальных) и трехчастичных (угловые распределения для троек Li–F–Li) функций распределения методами первопринципной и классической молекулярной динамики в прямом пространстве [3]. Предлагаемая работа продолжает данное теоретическое исследование с позиций парциальных структурных факторов фторида лития. При этом, для целей сопоставления с работами Абрамо, а именно, обсуждения вопроса о возникновении характерного плеча на парциальном структурном факторе типа S_{LiLi} , будут представлены, и результаты модели заряженных твердых сфер с ионными радиусами, рекомендованными в работе Абрамо и др. Кроме того, будут рассмотрены и парциальные структурные факторы другого типа, отражающие спектральную плотность флуктуаций плотности, заряда, а также их взаимного влияния (S_{NN} , S_{QQ} , S_{NQ}). Для последующего анализа будут представлены результаты расчетов парциальных структурных факторов, полученных с помощью компьютерного моделирования и средне-сферического приближения модели заряженных твердых сфер различающихся диаметров. Отличие нашего расчета от расчета Абрамо и др. по MSA (mean-spherical approximation – средне-сферическое приближение) версии модели заряженных твердых сфер заключается только в использовании точного решения Блюма для нахождения Фурье-образов прямых корреляционных функций [4], и, таким образом, более простого математического аппарата.

ВЫЧИСЛЕНИЕ ПАРЦИАЛЬНЫХ СТРУКТУРНЫХ ФАКТОРОВ СРЕДНЕ-СФЕРИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ МОДЕЛИ ЗАРЯЖЕННЫХ ТВЕРДЫХ СФЕР

Парциальные структурные факторы могут быть рассчитаны по Фурье образам прямых корреляционных функций с помощью следующего общего соотношения [5]:

$$S(k) = |1 - \tilde{C}(k)|, \quad (1)$$

где $S(k)$ – матрица, элементами которой являются парциальные структурные факторы $S_{ij}(k)$, 1 – единичная матрица, $\tilde{C}(k)$ – матрица компонентами которой являются $\rho\sqrt{x_i x_j} \tilde{C}_{ij}(k)$ Фурье образы прямых корреляционных функций. В работах Блюма были найдены явные выражения прямых корреляционных функций смеси заряженных твердых сфер с различающимися диаметрами и валентностями в прямом пространстве [6]. Фурье-образы $\tilde{C}(k)$ можно найти, в том числе, в нашей недавней работе [7]. В расчете использовалось экспериментальное значение плотности расплава фторида лития вблизи точки плавления $\rho \equiv N/V = 0.082 \text{ \AA}^{-3}$, где N – число частиц, находящихся в объеме V . Ионные радиусы лития и фтора были взяты из работы Абрамо и др. [1]. Для этого случая значение характерного декремента затухания плотности заряда во-

круг центрального иона, аналога дебаевской длины экранирования, было равно $\Gamma = 1.62 \text{ \AA}^{-1}$.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Расплав фторида лития моделировался с помощью двух разновидностей метода молекулярной динамики: классической и *ab initio* в рамках теории функционала электронной плотности (ТФП). Детали компьютерного моделирования подробно описаны в первой части [3], здесь приведем некоторые параметры расчета, необходимые для вычисления структурных факторов. Исследуемые ячейки содержат 2744 иона в случае классической МД и 216 ионов – для *ab initio* МД. Расчет парциальных структурных факторов $S_{\alpha\beta}(k)$ производился по прямому методу, с использованием траекторий движения частиц, используя стандартное выражение:

$$S_{\alpha\beta}(k) = \frac{1}{\sqrt{N_\alpha N_\beta}} \left\langle \sum_\alpha \sum_\beta e^{-ik(r_\alpha - r_\beta)} \right\rangle \quad (2)$$

здесь N_α – число частиц сорта α , r_α – радиус-вектор частицы сорта α , волновой вектор k определяется на интервале, зависящем от размеров моделируемой ячейки и его минимальное значение равно $k = \frac{2\pi}{L} \{1, 0, 0\}$. Экспонента в формуле (2) в случае однородных и изотропных жидкостей может быть представлена через скалярные величины, описывающие модуль расстояния между частицами и значение волнового вектора: $\sin(kR)/kR$. Параметр L есть длина ребра моделируемой кубической ячейки, который для случая классической МД равен 32.2 \AA . В угловых скобках суммирование ведется по координатам всех частиц и усредняется по ансамблю и времени моделирования.

Преимущество используемого прямого метода расчета ПСФ в сравнении с методом Фурье-преобразования радиальных функций распределения состоит и в большей простоте, и в уменьшении погрешностей в области малых k , так как это позволяет не рассматривать некорректную математическую задачу с бесконечными пределами Фурье-интегралов.

На рис. 1 приведены результаты расчетов парциального структурного фактора для пары катион-катион согласно трем подходам. Подчеркнем, что MSA-описание в точности соответствует расчетам в работе Абрамо и др., несмотря на различие в методологии. В нашей работе использовано точное решение Блюма, которое приводит к единственному уравнению связи для декремента затухания распределения плотности заряда вблизи центрального иона – Γ . В то время как в работах Абрамо и др. необходимо было решить систему алгебраических уравнений для определения семи параметров, описывающих функции распределения [8].

Рассмотрим конкретные детали сопоставления трех методов. Во-первых, хорошо видны недостатки модели заряженных твердых сфер в сравнении с уточненными моделями межйонного взаимодействия. А именно: а) сдвиг значений в область больших k и появление характерного плеча с правой стороны основного пика в окрестности 3 \AA^{-1} , б) при умеренных и больших углах рассеяния наблюдается расхождение и в фазе характерных осцилляций. Во-вторых, и превопринципный расчет, и классическая МД с потенциалом Букингема дают близкие результаты, но *ab initio* МД демонстрирует меньшую высоту первого пика (≈ 1.5 против 1.9) и его смещение в область малых волновых векторов (2.4 против 2.57 \AA^{-1}). На рис. 2 представлены результаты расчетов для ПСФ пары анион-анион. Видно, что все три модели неплохо согласуются между собой, особенно это касается MSA и МД (Букингом). *Ab initio* МД по-прежнему, предсказывает уменьшение высоты первого пика (≈ 1.65 против 2.1) и его аналогичное сме-

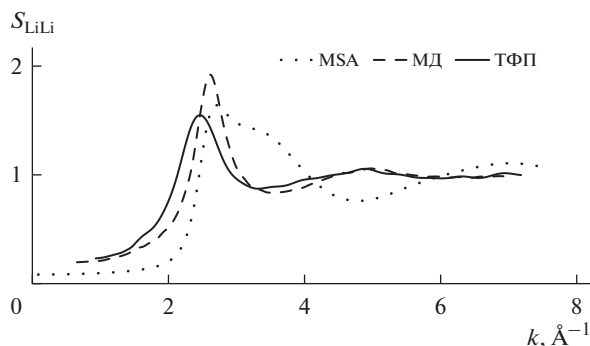


Рис. 1. Парциальные структурные факторы пары катион–катион, рассчитанные тремя методами при $T = 1200$ К и экспериментальной плотности расплава равной 1.77 г/см³.

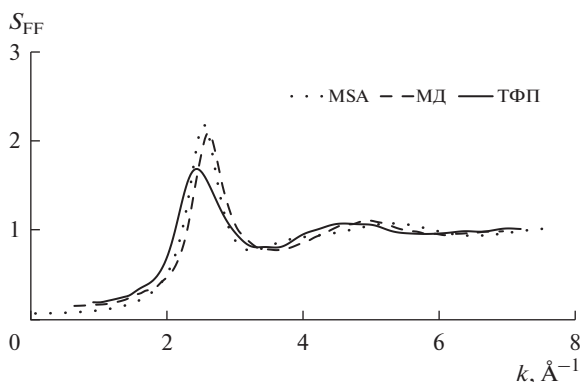


Рис. 2. Парциальные структурные факторы пары анион–анион, рассчитанные тремя методами при $T = 1200$ К.

шение (2.36 против 2.5 \AA^{-1}). На рис. 3 представлены результаты расчета ПСФ для разноименной пары по трем методам. И в этом случае предсказание классических моделей ближе друг к другу. Однако, модель заряженных твердых сфер несколько преувеличивает склонность к зарядовому упорядочению, демонстрируя более выраженный и узкий максимум вблизи значения $\approx 3.5 \text{ \AA}^{-1}$. Также хорошо видно, что прямое квантовое описание занижает амплитуду или характерный размах затухающих осцилляций, что, по всей видимости, следует связать с проявлением многочастичных эффектов из-за деформируемости электронных оболочек.

СПЕКТРАЛЬНАЯ ПЛОТНОСТЬ ФЛУКТУАЦИЙ ПЛОТНОСТИ И ЗАРЯДА

Помимо парциальных структурных факторов интересно также рассмотреть Фурье-образы парных корреляций плотности и заряда. Определим Фурье-компоненты плотности и заряда согласно стандартным формулам:

$$\tilde{\rho}(k) = \sum_i \tilde{\rho}_i(k), \quad \tilde{q}(k) = \sum_i Z_i \tilde{\rho}_i(k), \quad (3)$$

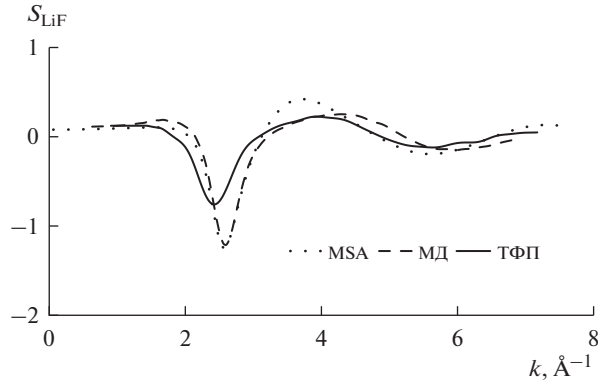


Рис. 3. Парциальные структурные факторы пары катион–анион, рассчитанные тремя методами при $T = 1200$ К.

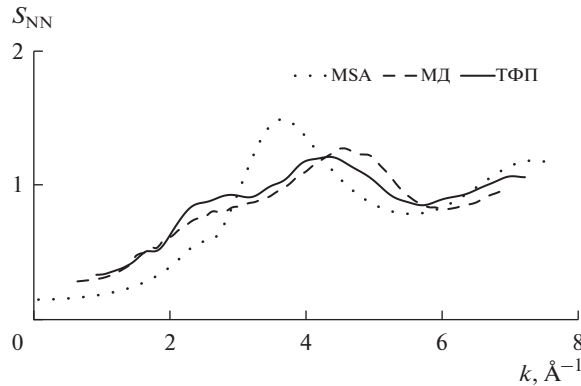


Рис. 4. Рассчитанные структурные факторы типа плотность–плотность расплава LiF, полученные тремя методами.

Выпишем теперь соответствующие флуктуационные структурные факторы, которые описывают спектральную плотность пространственных парных корреляций плотности и заряда, а также вклады в упругое рассеяние, описывающие их взаимное влияние:

$$\begin{aligned}
 S_{NN} &= \frac{1}{\rho} \langle \tilde{\rho}(-k) \tilde{\rho}(k) \rangle = \frac{1}{2} (S_{\text{LiLi}} + 2S_{\text{LiF}} + S_{\text{FF}}), \\
 S_{QQ} &= \frac{1}{\rho} \langle \tilde{q}(-k) \tilde{q}(k) \rangle = \frac{1}{2} (S_{\text{LiLi}} - 2S_{\text{LiF}} + S_{\text{FF}}), \\
 S_{NQ} &= \frac{1}{\rho} \langle \tilde{\rho}(-k) \tilde{q}(k) \rangle = \frac{1}{2} (S_{\text{LiLi}} - S_{\text{FF}}).
 \end{aligned} \tag{4}$$

Видно, что данные структурные факторы легко пересчитываются из рассчитанных ПСФ. На рис. 4 представлены результаты расчетов структурного фактора типа плотность–плотность по всем трем моделям. Наблюдаются существенные различия между МД-описанием квантового и классического случаев от упрощенной модели заряжен-

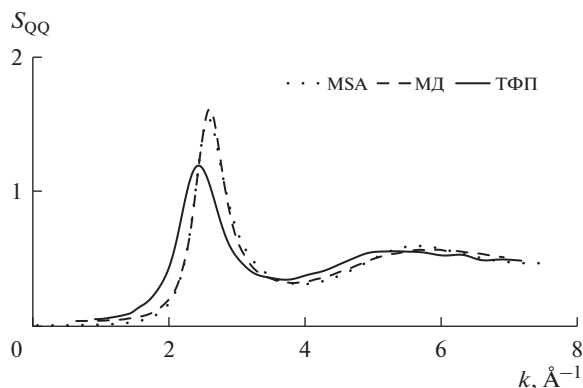


Рис. 5. Рассчитанные структурные факторы типа заряд–заряд расплава LiF, полученные тремя методами.

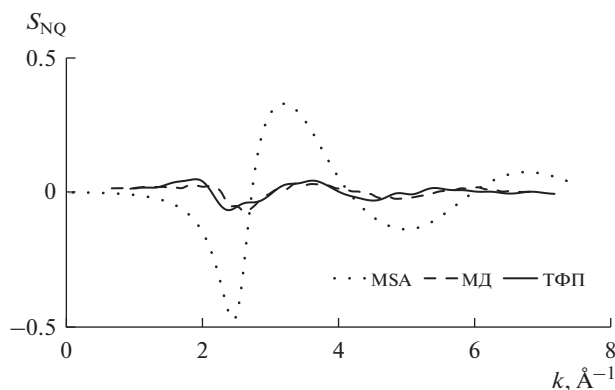


Рис. 6. Рассчитанные перекрестные структурные факторы типа плотность–заряд расплава LiF.

ных твердых сфер. MSA-описание демонстрирует лишь незначительное плечо слева ($\approx 2.4 \text{ \AA}^{-1}$) от основного максимума лежащего ($\approx 3.5 \text{ \AA}^{-1}$). В это же время и квантовая, и классическая МД предсказывают существование двух максимумов, лежащих при $k \approx \approx 2.4$ и $k \approx 4.4 \text{ \AA}^{-1}$, соответственно. Отметим, что эти максимумы характеризуются значительной размытостью. Чем больше значение волнового вектора ($>6 \text{ \AA}^{-1}$), тем ближе предсказания для всех трех моделей.

На рис. 5 приведен структурный фактор заряд–заряд; видно в целом неплохое согласие всех трех подходов, особенно классического описания МД и модели заряженных твердых сфер. Можно опять отметить заметное уменьшение высоты первого пика (2.3 против 3.1) и его смещение в область малых k (≈ 2.3 против $\approx 2.5 \text{ \AA}^{-1}$) для результатов *ab initio* МД по сравнению с двумя другими моделями.

На рис. 6 показан Фурье-образ перекрестного коррелятора плотность–заряд, который описывает взаимное влияние локального распределения плотности и заряда. Нетрудно видеть, что максимум такого влияния на качественном уровне хорошо описывает модель заряженных твердых сфер. Минимум при $k \approx 2.3 \text{ \AA}^{-1}$ и близкие максимумы в области $3.1\text{--}3.4 \text{ \AA}^{-1}$ описывают все три модели. Однако, характерная амплитуда

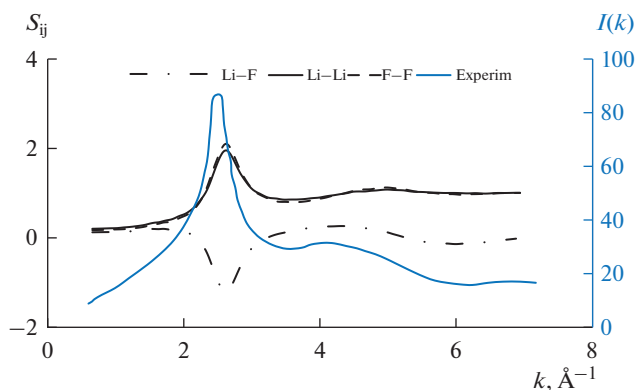


Рис. 7. Парциальные структурные факторы расплава LiF, рассчитанные с помощью классической МД с потенциалом Букингема и относительная экспериментальная интенсивность дифракционного рассеяния [9].

затухающих осцилляций явно завышена для модели заряженных твердых сфер. Кроме того, в области $k > 4.5 \text{ \AA}^{-1}$ имеет место и несовпадение фаз с молекулярно-динамическими моделями.

На рис. 7 представлены результаты расчетов ПСФ, полученные методом классической молекулярной динамики для различных пар ионов, вместе с экспериментальными данными относительной интенсивности рентгеновского упругого рассеяния для расплавленного фторида лития [9]. В целом можно отметить хорошее согласие теории и эксперимента. К сожалению, более подробного сопоставления до сих пор невозможно провести вследствие отсутствия данных трех независимых дифракционных экспериментов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Отметим несколько наиболее важных результатов. Во-первых, ПСФ, полученные в рамках средне-сферического приближения модели заряженных твердых сфер, имеют ряд отличий от данных компьютерного моделирования. Характерные затухающие осцилляции отличаются для электростатической модели с жестким ядром отталкивания большей амплитудой, а также сдвигом по фазе для $k > 4 \text{ \AA}^{-1}$. Во-вторых, для пары катион-катион основной пик имеет правое плечо, что не наблюдается ни для классической МД с парными потенциалами, ни для *ab initio* МД. Добавим также, что имеющиеся экспериментальные данные вряд ли подтверждают существование особенностей в виде плеча в окрестности первого пика структурного фактора для иона, который меньше по отношению к противоположно заряженному компоненту солевого расплава. По нашему мнению, присутствие таких особенностей, или даже расщеплений первых пиков, при теоретическом описании локальной структуры в галогенидах щелочных металлов надо связывать именно с сингулярным характером отталкивательной ветви парного потенциала, т.е., с упрощенным характером модели заряженных твердых сфер. Известно [10], что MSA завышает кулоновское упорядочение на расстояниях порядка суммы ионных радиусов. Причем, функция радиального распределения для пары катион-анион на расстоянии тесного контакта может становиться отрицательной (нефизичной). Тем не менее, основные особенности дифракционной картины, как и было продемонстрировано Абрамо и др., могут быть описаны на вполне приемлемом полуквантовом уровне. Небольшие различия в описании радиаль-

ных функций распределения методами классической и первопринципной молекулярной динамики могут быть связаны с деформируемостью электронных оболочек при квантово-химическом описании, что отмечалось в работах Маддена и соавторов [11, 12]. Трехчастичные функции вероятности оказываются близки друг к другу, однако минорные отличия все же можно наблюдать даже и в случае наиболее легких ионов лития и фтора.

В предложенной серии из двух статей рассмотрены особенности локальной структуры расплава фторида лития с позиций различных моделей микроскопической теории. В целом можно отметить хорошее согласие результатов классической и квантовой молекулярной динамики для подобных систем. Будет несправедливым недооценить и роль модели заряженных твердых сфер в быстрых и оценочных расчетах структурных факторов, которые также способствуют пониманию и интерпретации экспериментальных данных по упругой дифракции рентгеновских лучей и тепловых нейтронов на уровне сопоставления.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Abramo M.C., Caccamo C., Pizzimenti G., Parrinello M., Tosi M.P. Ionic radii and diffraction patterns of molten alkali halides // *J. Chem. Phys.* 1978. **68**. № 6. P. 2889–2895.
2. Ribeiro M.C.C. Chemla effect in molten LiCl/KCl and LiF/KF mixtures // *J. Phys. Chem. B.* 2003. **107**. P. 4392–4402.
3. Закирьянов Д.О., Кобелев М.А., Ткачев Н.К. Локальная структура расплава фторида лития I. Расчет трехчастичных и радиальных функций распределения методами *ab initio* и классической молекулярной динамики // *Расплавы*. 2022. № 4. С. 408–418.
4. Blum L. // *Mol. Phys.* 1975. **30**. № 5. P. 1529–1535.
<https://doi.org/10.1080/00268977500103051>
5. Blum L., Hoyer J.S. // *J. Phys. Chem.* 1977. **81**. № 13. P. 1311–1316.
<https://doi.org/10.1021/j100528a019>
6. Blum L. *Theoretical Chemistry: Advances and Perspectives*. 1980. **5**. P. 1–69.
<https://doi.org/10.1016/B978-0-12-681905-2.50007-4>
7. Davydov A.G., Tkachev N.K. // *J. Mol. Liq.* 2020. **318**. P. 114045.
<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.114045>
8. Abramo M.C., Caccamo C., Pizzimenti G. Thermodynamics and structure of charged hard-sphere fluids in the mean spherical model // *Phys. Chem. Liquids*. 1977. **6**. № 3. P. 167–188.
9. Zarzycki J. // *J. Phys. Phys. Appl.* 1957. **18**. P. 65–69.
<https://doi.org/10.1051/jphysap:0195700180706500>
10. Baus M., Hansen M.-J. // *Phys. Rep.* 1980. **59**. № 1. P. 1–94.
[https://doi.org/10.1016/0370-1573\(80\)90022-8](https://doi.org/10.1016/0370-1573(80)90022-8)
11. Wilson M., Madden P.A. // *J. Phys.: Cond. Matter*. 1993. **5**. № 17. P. 2687–2706.
<https://doi.org/10.1088/0953-8984/5/17/004>
12. Sallane M., Madden P.A. Polarization effects in ionic solids and melts // *Mol. Phys.* 2011. **109**. № 19. P. 2299–2315.

LOCAL STRUCTURE OF MOLTEN LiF II. CALCULATION OF PARTIAL STRUCTURE FACTORS BY THE *ab initio* AND CLASSICAL MOLECULAR DYNAMICS METHODS

M. A. Kobelev¹, D. O. Zakiryanov¹, N. K. Tkachev¹

¹*Institute of high-temperature electrochemistry Ural branch of RAS, Yekaterinburg, Russia*

Calculations of partial structural factors of a molten lithium fluoride at a temperature of 1200 K are carried out by three methods: *ab initio* and classical molecular dynamics, as well as within the model of charged hard spheres in the mean-spherical approximation. It is shown that despite the general topology of the calculated partial structure factors for all three methods, the key feature of the computer simulation results is the absence of a shoulder on the right side of the first peak of the cation-cation structure factor. It is suggested that the observed difference can be related to the Buckingham softness of the repulsive part of the

pair potential in the case of the classical model in molecular dynamics calculations. Calculations using by *ab initio* molecular dynamics also confirm this conclusion. The results of calculating the density-density structural factor by computer simulation methods demonstrate the presence of two maxima lying at $k \approx 2.4$ and $k \approx 4.4 \text{ \AA}^{-1}$, respectively. At the same time, within the model of charged hard spheres, there is one maximum at $k \approx 3.5 \text{ \AA}^{-1}$ and a small shoulder on the left, the position of which coincides with the first maximum obtained by computer simulation methods. The observed differences can be related to the fact that the calculated curve of the partial cation-anion structure factor within the framework of the model of charged hard spheres has a higher amplitude in the vicinity of the wave vector $\approx 3.5 \text{ \AA}^{-1}$.

Keywords: structural factors, molten LiF, molecular dynamics, density functional theory

REFERENCES

1. Abramo M.C., Caccamo C., Pizzimenti G., Parrinello M., Tosi M.P. Ionic radii and diffraction patterns of molten alkali halides // *J. Chem. Phys.* 1978. **68**. № 6. P. 2889–2895.
2. Ribeiro M.C.C. Chemla effect in molten LiCl/KCl and LiF/KF mixtures // *J. Phys. Chem. B.* 2003. **107**. P. 4392–4402.
3. Zakiryanov D.O., Kobelev M.A., Tkachev N.K. Lokal'naya struktura rasplava florida litiya I. Raschet trekhchastichnykh i radial'nykh funktsiy raspredeleniya metodami *ab initio* i klassicheskoy molekulyarnoy dinamiki [Local structure of lithium fluoride melt I. Calculation of three-particle and radial distribution functions by *ab initio* and classical molecular dynamics methods] // *Rasplavy*. 2022. № 4. P. 408–418. [In Russian].
4. Blum L. // *Mol. Phys.* 1975. **30**. № 5. P. 1529–1535.
<https://doi.org/10.1080/00268977500103051>
5. Blum L., Høye J.S. // *J. Phys. Chem.* 1977. **81**. № 13. P. 1311–1316.
<https://doi.org/10.1021/j100528a019>
6. Blum L. *Theoretical Chemistry: Advances and Perspectives*. 1980. **5**. P. 1–69.
<https://doi.org/10.1016/B978-0-12-681905-2.50007-4>
7. Davydov A.G., Tkachev N.K. // *J. Mol. Liq.* 2020. **318**. P. 114045.
<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.114045>
8. Abramo M.C., Caccamo C., Pizzimenti G. Thermodynamics and structure of charged hard-sphere fluids in the mean spherical model // *Phys. Chem. Liquids*. 1977. **6**. № 3. P. 167–188.
9. Zarzycki J. // *J. Phys. Phys. Appl.* 1957. **18**. P. 65–69.
<https://doi.org/10.1051/jphysap:0195700180706500>
10. Baus M., Hansen M.-J. // *Phys. Rep.* 1980. **59**. № 1. P. 1–94.
[https://doi.org/10.1016/0370-1573\(80\)90022-8](https://doi.org/10.1016/0370-1573(80)90022-8)
11. Wilson M., Madden P.A. // *J. Phys.: Cond. Matter*. 1993. **5**. № 17. P. 2687–2706.
<https://doi.org/10.1088/0953-8984/5/17/004>
12. Sallane M., Madden P.A. Polarization effects in ionic solids and melts // *Mol. Phys.* 2011. **109**. № 19. P. 2299–2315.