

2. ТЕОРИЯ НАНОСИСТЕМ

УДК 538.971

Оригинальная статья

Межфазная энергия кристаллов алюминия на границе с неполярными органическими жидкостями

А.М. Апеков¹, И.Г. Шебзухова², Л.А. Хамукова¹

¹Региональный научно-образовательный математический центр

«Северо-Кавказский центр математических исследований»

ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»

355017, Россия, Ставропольский край, Ставрополь, ул. Пушкина 1

²ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный университет

им. Х.М. Бербекова»

360004, Россия, Кабардино-Балкарская республика, Нальчик, ул. Чернышевского, 173

aslkbbsu@yandex.ru, irina.shebzukhova@mail.ru, khamuk@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.318

Аннотация: Понимание энергетических характеристик на границе металл-органическое вещество имеет большое значение для разработки техники и технологий в различных отраслях промышленного производства. В этой связи наблюдается большой интерес к изучению процессов, протекающих на данной границе раздела. Особо стоит выделить бурный рост работ по исследованию свойств металл-органических каркасных структур, что связано с возможностью синтезировать данные структуры с необходимыми свойствами, благодаря варьированию длины органической молекулы, соединяющей атомы металлов или их оксидов, а также подбору элементного состава. В данной работе получены значения межфазной энергии на границах граней кристалла алюминия с органическими жидкостями в рамках электронно-статистического метода с учетом поляризации металлических ионов и молекул органической жидкости, а также дисперсионного взаимодействия ячеек Вигнера-Зейтца на поверхности раздела. Получена зависимость межфазной энергии и поправок к межфазной энергии от диэлектрической проницаемости жидкости и ориентации металлического кристалла. Установлено, что дисперсионная поправка вносит положительный вклад, а поляризационная – снижает межфазную энергию.

Ключевые слова: межфазная энергия, поляризационная поправка, дисперсионная поправка, электронно-статистический метод, неполярная органическая жидкость, алюминий.

1. Введение

В настоящее время наблюдается бурный рост работ посвященных исследованию строения, свойств и методам получения металл-органических каркасных структур. Данные структуры состоят из атомов различных металлов или их оксидов соединенные органическими молекулами (лигандами) в самые разнообразные пористые структуры. Варьируя элементный состав как металлов, так и лигандов можно создавать металл-органические каркасные структуры с требуемыми свойствами [1, 2]. Металл-органические структуры имеют широкий диапазон применения: для хранения водорода [3]; при высокоэффективном противоопухолевом лечении [4]; для разработки оптических и

люминесцентных, фотоактивных, магнитных материалов [5-7]; при производстве аккумуляторов [8, 9]; для создания материалов для нейтрализации и поглощения токсичных газов [10]; для адресной доставки лекарственных препаратов [11-14]; для разделения и очистки газов [15, 16]. Пористые металл-органические каркасные структуры используются и для получения наночастиц оксидов металлов, квантовых точек и соединений в которых используются квантовые свойства включенных фаз [17-20].

Существенный интерес представляют металл-органические структуры на основе алюминия [4, 21]. Третьим по распространенности элементом в земной коре и самым распространенным среди металлов является алюминий, который находит широкое применение в различных электрохимических энергетических системах. Его объемная емкость в четыре раза выше, чем у лития. Благодаря таким преимуществам как низкая стоимость, безопасность и экологичность, алюминий и его сплавы широко используются в композитах и наноструктурированных материалах при создании высокоэффективных электродов для систем электрохимического накопления энергии [22]. Перезаряжаемые аккумуляторы на основе алюминия отличаются низкой стоимостью, низкой воспламеняемостью и высокой емкостью, поэтому внедрение батарей на основе алюминия может привести к существенному прогрессу в технологии накопления энергии [23]. Алюминий обладает такими характерными свойствами как высокое соотношение прочности к весу, хорошая коррозионная стойкость и возможность вторичной переработки, это делают его идеальным кандидатом для замены более тяжелых материалов в автомобилестроении, что отвечает требованиям автомобильной промышленности по снижению веса [24]. В данной работе ставилась цель оценить межфазную энергию (МЭ) граней кристаллов алюминия на границе с неполярными органическими жидкостями в рамках электронно-статистической теории МЭ металлов [25-31].

2. Основные формулы и результаты вычислений

Из решения уравнения Томаса-Ферми (ТФ) для внутренней и внешней областей металла находятся ход электронной плотности и потенциала вблизи границы раздела металл-органическая жидкость с учетом макроскопической диэлектрической проницаемости жидкости и МЭ определяется относительно гиббсовой поверхности раздела с учетом поляризационной, дисперсионной, осцилляционной поправок и температурного вклада по формуле:

$$f_{\omega 12}(hkl) = f_{\omega 12}^{(0i)}(hkl) + f_{\omega 12}^{(0e)}(hkl) + f_{\omega 12}^p(hkl) + f_{\omega 12}^g(hkl) + f_{\omega 12}^{osc}(hkl) + \Delta f_{\omega 12}^T(hkl). \quad (1)$$

Здесь для внутреннего $f_{\omega 12}^{(0i)}(hkl)$ и внешнего $f_{\omega 12}^{(0e)}(hkl)$ вкладов в МЭ использовали формулы полученные в [26, 30].

Поляризационная поправка $f_{\omega 12}^p(hkl)$ к МЭ определяется как сумма вкладов внутреннего – связанного с поляризацией металлических ионов переходного слоя $f_{\omega 12}^{pi}(hkl)$ и внешнего – связанного с поляризацией органической жидкости $f_{\omega 12}^{pe}(hkl)$ [27, 28]

$$f_{\omega 12}^p(hkl) = f_{\omega 12}^{pi}(hkl) + f_{\omega 12}^{pe}(hkl), \quad (2)$$

$$f_{\omega 12}^{(pi)}(hkl) = -\frac{\alpha V_F^2 n^2}{s^2 b^2} \frac{(1 - \chi(0, \varepsilon))^2}{\lambda^2} \left[\left(1 - \frac{r + x_r(\varepsilon)}{bs\lambda} \right)^{-2(n+1)} + \left(1 - \frac{r + x_r(\varepsilon) + \delta(hkl)}{bs\lambda} \right)^{-2(n+1)} \right] n(hkl), \quad (3)$$

$$f_{\omega 12}^{(pe)}(hkl) = -\frac{2V_F^2}{3\pi} \frac{\chi^2(0, \varepsilon)}{sb\lambda^9} \left(1 + \frac{r + x_r(\varepsilon)}{b\lambda s} \right)^{-9} \frac{S^\mu}{N_A} \times \\ \times \left[1 + \frac{18\chi^2(0, \varepsilon)}{15\pi b^2 \lambda^{10}} \left(\frac{V_F}{s} \right)^2 \left(1 + \frac{r + x_r(\varepsilon)}{b\lambda s} \right)^{-10} U \right] \frac{\mu(\varepsilon - 1)}{d(\varepsilon + 2)} n(hkl). \quad (4)$$

Здесь $\chi(0, \varepsilon)$ – безразмерный потенциал на физической поверхности раздела, $x_r(\varepsilon)$ – координата гиббсовой поверхности раздела, $n(\varepsilon)$ и b параметры безразмерного потенциала (являются функциями диэлектрической проницаемости ε органической жидкости), α – поляризуемость металла, V_F – потенциал Ферми, s – параметр приводящий уравнение ТФ к безразмерному виду, λ – вариационный параметр, минимизирующий поверхностную энергию металла при учете обменной поправки, r – радиус металлического иона, R – радиус сферы равновеликой ячейки Вигнера-Зейтца, $\delta(hkl)$ – межплоскостное расстояние, $n(hkl)$ – концентрация частиц на грани металлического кристалла, $S^\mu = f N^{1/2} (A/D)^{2/3}$, f – множитель зависящий от координационного числа металлического кристалла, A и D – атомный вес и плотность металла, N_A – число Авогадро, U – учитывает электрострикционный эффект, μ и d – молярная масса и плотность органической жидкости.

Поправка на дисперсионное взаимодействие ячеек Вигнера-Зейтца к МЭ грани металлического кристалла на границе с неполярной органической жидкостью находим в виде [28, 31]:

$$f_{\omega 12}^g(hkl) = 12,115 f \left(\frac{A}{N_A D} \right)^{2/3} \frac{\hbar(z/\gamma)^{1/2}}{R^{7/2} \left(1 - \frac{r - x_r(\varepsilon)}{R} \right)^2} \left(1 - \frac{2}{k - n(\varepsilon)} \right) n(hkl), \quad (5)$$

где $\gamma = m^*/m$, m^* и m – эффективная масса электрона и масса свободного электрона соответственно, z – число свободных электронов на атом.

Поправка к МЭ на осцилляцию электронной плотности в периодическом поле кристалла на поверхности раздела фаз получена в виде

$$f_{\omega 12}^{osc}(hkl) = 35,6 \left(\frac{z^{5/4}}{N_A} \right)^{2/3} f \left(\frac{D}{A} \right)^{1/6} n(hkl). \quad (6)$$

По формулам (1) – (6) проведены вычисления МЭ, поправок к МЭ граней (100), (110) и (111) кристалла алюминия на границе с неполярными органическими жидкостями – пентаном, гексаном, гептаном, октаном, деканом, нонаном, *n*–, *m*–, *o*–ксилолом, бензолом, толуолом (см. рис. 1-4).

На рисунках представлена зависимость от диэлектрической проницаемости жидкости поляризационной поправки (см. рис. 1, 2), дисперсионной поправки (см. рис. 3) и МЭ с учетом поправок (см. рис. 4).

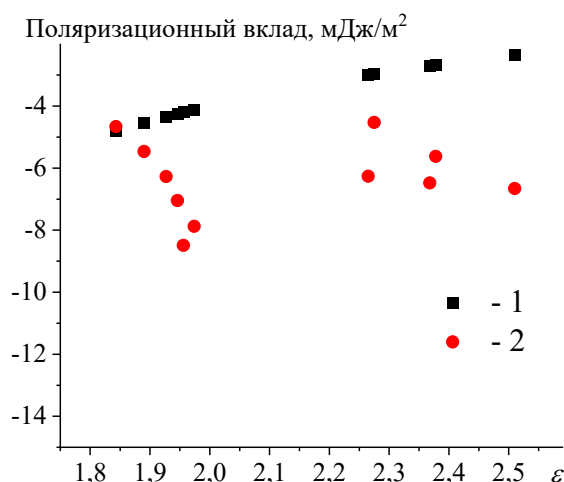


Рис. 1. Зависимость внутреннего – 1 и внешнего – 2 вкладов в поляризационную поправку от диэлектрической проницаемости органической жидкости.

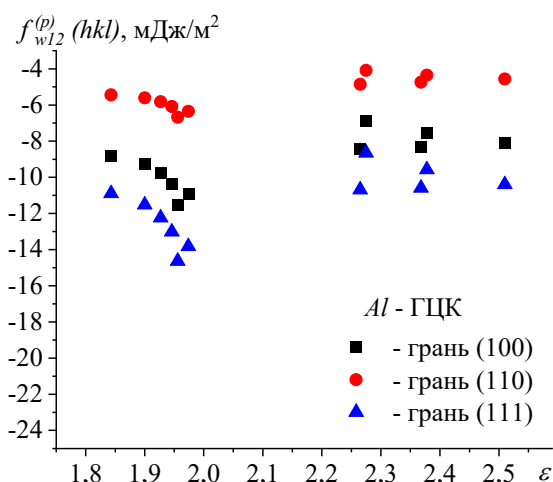


Рис. 2. Зависимость поляризационной поправки к межфазной энергии граней алюминия от диэлектрической проницаемости органической жидкости.

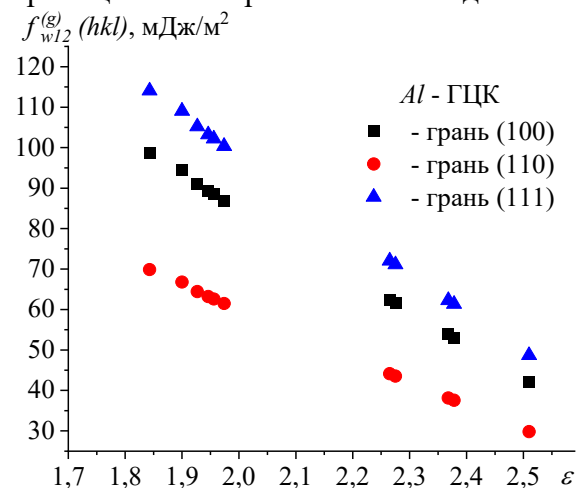


Рис. 3. Дисперсионная поправка к межфазной энергии граней алюминия на границе с неполярными органическими жидкостями.

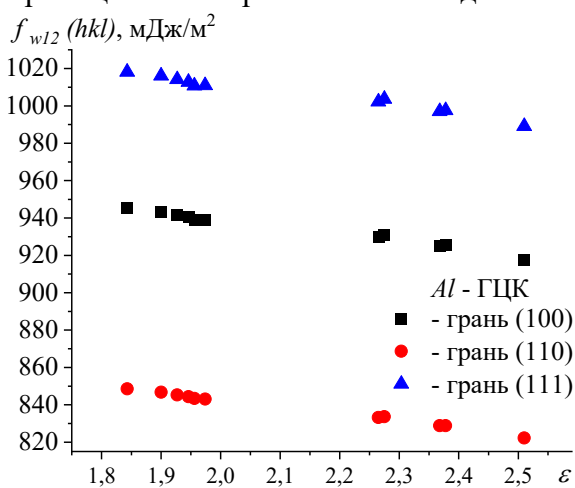


Рис. 4. Зависимость межфазной энергии от диэлектрической проницаемости органической жидкости.

Из рис. 1 видно, что вклад связанный с поляризацией поверхностных

ионов металла отрицательный и линейно уменьшается по величине с увеличением диэлектрической проницаемости жидкости. Скачкообразное изменение вклада связанного с поляризацией органической жидкости на границе раздела обусловлено характером изменения отношения молярной массы к плотности для разных органических жидкостей в формуле (4). В целом поляризационная поправка (см. рис. 2) к МЭ отрицательна и слабо изменяется в зависимости от диэлектрической проницаемости жидкости. Наибольшее значение по величине имеет грань (111) а наименьшее грань (110).

Поправка на дисперсионное взаимодействие вносит положительный вклад в МЭ и с увеличением диэлектрической проницаемости линейно снижается (см. рис. 3). Полученные результаты показывают, что МЭ граней кристалла алюминия существенно зависят от ориентации граней и соотносятся как $f_{\omega 12}(111) > f_{\omega 12}(100) > f_{\omega 12}(110)$. Для граней (100), (110), (111) алюминия МЭ линейно убывает с увеличением диэлектрической проницаемости органической жидкости.

3. Заключение

Поляризационная поправка к МЭ алюминия отрицательна и слабо зависит от диэлектрической проницаемости органической жидкости. Дисперсионное взаимодействие вносит положительный вклад в МЭ и с увеличением диэлектрической проницаемости линейно снижается. Межфазная энергия алюминия линейно убывает с увеличением диэлектрической проницаемости органической жидкости, а ее значения существенно зависят от ориентации.

Библиографический список:

1. **Ryder, M.R.** Nanoporous metal organic framework materials for smart applications / M.R. Ryder, J.-C. Tan // *Materials Science and Technology*. – 2014. – V. 30. – I. 13. – P. 1598-1612. DOI: 10.1179/1743284714y.0000000550.
2. **Butova, V.V.** Metal-organic frameworks: structure, properties, methods of synthesis and characterization / V.V. Butova, M.A. Soldatov, A.A. Guda et al. // *Russian Chemical Reviews*. – 2014. – V. 85. – № 3. – P. 280-307. DOI: 10.1070/RCR4554.
3. **Prabhakaran, P.K.** Aluminium doping composite metal-organic framework by alane nanoconfinement: Impact on the room temperature hydrogen uptake / P.K. Prabhakaran, L. Catoire, J. Deschamps // *Microporous and Mesoporous Materials*. – 2017. – V. 243. – P. 214-220. DOI: 10.1016/j.micromeso.2017.02.032.
4. **Zeraati, M.** Synthesis of Al-Based metal-organic framework in water with caffeic acid ligand and NaOH as linker sources with highly efficient anticancer treatment / M. Zeraati, A. Rahdar, D.I. Medina, G. Sargazi // *Frontiers in Chemistry*. – 2021. – V. 9. – Art. № 784461. – 9 p. DOI: 10.3389/fchem.2021.784461
5. **Hu, Z.** Luminescent metal-organic frameworks for chemical sensing and explosive detection / Z. Hu, B.J. Deibert, J. Li // *Chemical Society Reviews*. – 2014. – V. 43. – I. 16. – P. 5815-5840. DOI: 10.1039/c4cs00010b.
6. **Sato, H.** Photoactivation of a nanoporous crystal for on-demand guest trapping and conversion/ H. Sato, R. Matsuda, K. Sugimoto, M. Takata, S. Kitagawa // *Nature Materials*. – 2010. – V. 9. – P. 661-666. DOI: 10.1038/nmat2808.
7. **Zhang, W.** Ferroelectric metal-organic frameworks / W. Zhang, R.-G. Xiong // *Chemical Reviews*. – 2012. – V. 112. – I. 2. – P. 1163-1195. DOI: 10.1021/cr200174w.

8. **Tu, J.** Nonaqueous rechargeable aluminum batteries: progresses, challenges, and perspectives / J. Tu, W.-L. Song, H. Lei et al. // *Chemical Reviews*. – 2021. – V. 121. – I. 8. – P. 4903-4961. DOI: 10.1021/acs.chemrev.0c01257.
9. **Elia, G.A.** An overview and prospective on Al and Al-ion battery technologies / G.A. Elia, K.V. Kravchyk, M.V. Kovalenko et al. // *Journal of Power Sources*. – 2021. – V. 481. – Art. № 228870. – 22 p. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2020.228870.
10. **Barea, E.** Toxic gas removal – metal–organic frameworks for the capture and degradation of toxic gases and vapours / E. Barea, C. Montoro, J. Navarro // *Chemical Society Reviews*. – 2014. – V. 43. – I. 16. – P. 5419-5430. DOI: 10.1039/c3cs60475f.
11. **Xiao, B.** High-capacity hydrogen and nitric oxide adsorption and storage in a metal-organic framework / B. Xiao, P.S. Wheatley, X. Zhao et al. // *Journal of the American Chemical Society*. – 2007. – V. 129. – I. 5. – P. 1203-1209. DOI: 10.1021/ja066098k.
12. **Horcajada, P.** Porous metal-organic-framework nanoscale carriers as a potential platform for drug delivery and imaging / P. Horcajada, T. Chalati, C. Serre et al. // *Nature Materials*. – 2010. – V. 9. – P. 172-178. DOI: 10.1038/nmat2608.
13. **Horcajada, P.** Metal–Organic Frameworks in Biomedicine / P. Horcajada, R. Gref, T. Baati et al. // *Chemical Reviews*. – 2012. – V. 112. – I. 2. – P. 1232-1268. DOI: 10.1021/cr200256v.
14. **Bloch, E.D.** Gradual release of strongly bound nitric oxide from Fe₂(NO)₂. / E.D. Bloch, W.L. Queen, S. Chavan et al. // *Journal of the American Chemical Society*. – 2015. – V. 137. – I. 10. – P. 3466-3469. DOI: 10.1021/ja5132243.
15. **Qiu, S.** Metal–organic framework membranes: from synthesis to separation application. / S. Qiu, M. Xue, G. Zhu // *Chemical Society Reviews*. – 2014. – V. 43. – I. 16. – P. 6116-6140. DOI: 10.1039/C4CS00159A.
16. **Rodenas, T.** Metal–organic framework nanosheets in polymer composite materials for gas separation / T. Rodenas, I. Luz, G. Prieto et al. // *Nature Materials*. – 2015. – V. 14. – P. 48-55. DOI: 10.1038/nmat4113.
17. **Gabuda, S.P.** Supramolecular interactions and structural transformations in the metal-organic sorbent-acetone nanoreactor system / S.P. Gabuda, S.G. Kozlova, D.N. Dybtsev, V.P. Fedin // *Journal of Structural Chemistry*. – 2009. – V. 50. – I. 5. – P. 887-894. DOI: 10.1007/s10947-009-0132-x.
18. **Gabuda, S.P.** Quantum rotations and chiral polarization of qubit prototype molecules in a highly porous metal–organic framework: ¹H NMR T₁ study / S.P. Gabuda, S.G. Kozlova, D.G. Samsonenko, D.N. Dybtsev, V.P. Fedin // *Journal of Physical Chemistry C*. – 2011. – V. 115. – I. 42. – P. 20460-20465. DOI: 10.1021/jp206725k.
19. **Xu, X.** Spindle-like mesoporous α-Fe₂O₃ anode material prepared from MOF template for high-rate lithium batteries / X. Xu, R. Cao, S. Jeong, J. Cho // *Nano Letters*. – 2012. – V. 12. – I. 9. – P. 4988-4991. DOI: 10.1021/nl302618s.
20. **Yang, S.J.** Preparation and exceptional lithium anodic performance of porous carbon-coated ZnO quantum dots derived from a metal-organic framework / S.J. Yang, S. Nam, T. Kim et al. // *Journal of the American Chemical Society*. – 2013. – V. 135. – I. 20. – P. 7394-7397. DOI: 10.1021/ja311550t.
21. **Langseth, E.** Synthesis and characterization of Al@MOF materials / E. Langseth, O. Swang, B. Arstad et al. // *Materials Chemistry and Physics*. – 2019. – V. 226. – P. 220-225. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2019.01.009.
22. **Manikkoth, M.** Aluminium alloys and composites for electrochemical energy systems / M. Manikkoth, S.K. Kannan, J.M. Gladis, T.P.D. Rajan // *Progress in Materials Science*. – 2024. – V. 146. – Art. № 101322. – 89 p. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2024.101322.
23. **Lin, M.-C.** An ultrafast rechargeable aluminium-ion battery / M.-C. Lin, M. Gong, B. Lu et al. // *Nature*. – 2015. – V. 520. – P. 325-328. DOI: 10.1038/nature14340.
24. **Miller, W.S.** Recent development in aluminium alloys for the automotive industry / W.S. Miller, L. Zhuang, J. Bottema et al. // *Materials Science and Engineering: A*. – 2000. – V. 280. – I. 1. – P. 37-49. DOI: 10.1016/S0921-5093(99)00653-X.
25. **Апеков, А.М.** Ориентационная зависимость межфазной энергии низкотемпературной модификации титана на границе с органической жидкостью / А.М. Апеков, И.Г. Шебзухова // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2022. – Вып. 14. – С. 17-23. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.017.
26. **Апеков, А.М.** Interface energy of crystal faces of IIA-type metals at boundaries with nonpolar organic liquids, allowing for dispersion and polarization corrections / А.М. Апеков, И.Г. Шебзухова // *Bulletin of Russian Academy of Science. Physics*. – 2019. – V. 83. – I. 6. – P. 760-763. DOI: 10.3103/S1062873819060078.
27. **Апеков, А.М.** Polarization correction to the interfacial energy of faces of alkali metal crystals at the borders with a nonpolar organic liquid / А.М. Апеков, И.Г. Шебзухова // *Bulletin of Russian Academy of Science. Physics*. – 2018. – V. 82. – I. 7. – P. 789-792. DOI: 10.3103/S1062873818070067.

28. Апеков, А.М. Поляризационная и дисперсионная поправки к межфазной энергии граней кристаллов низкотемпературных модификаций кальция и бария на границе с неполярными органическими жидкостями / А.М. Апеков, И.Г. Шебзухова // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2018. – I. 10. – P. 20-26. DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.020.
29. Shebzukhova, I.G. Orientation dependence of the interfacial energies of chromium and α -iron crystals at boundaries with nonpolar organic liquids / I.G. Shebzukhova, A.M. Apekov, Kh.B. Khokonov // Bulletin of Russian Academy of Science. Physics. – 2017. – V. 81. – I. 5. – P. 605-607. DOI: 10.3103/S1062873817050173.
30. Shebzukhova, I.G. Anisotropy of the interface energy of IA and IB metals at a boundary with organic liquids / I.G. Shebzukhova, A.M. Apekov, Kh.B. Khokonov // Bulletin of Russian Academy of Science. Physics. – 2016. – V. 80. – I. 6. – P. 657-659. DOI: 10.3103/S1062873816060307.
31. Апеков, А.М. Вклад дисперсионного взаимодействия в межфазную энергию кристаллов кобальта на границе с неполярными органическими жидкостями / А.М. Апеков, И.Г. Шебзухова // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2023. – V. 15. – P. 231-238. DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.231.

References:

1. Ryder M. R., Tan J.-C. Nanoporous metal organic framework materials for smart applications, *Materials Science and Technology*, 2014, vol. 30, issue 13, pp. 1598-1612. DOI: 10.1179/1743284714y.0000000550.
2. Butova V.V., Soldatov M.A., Guda A.A. et al. Metal-organic frameworks: structure, properties, methods of synthesis and characterization, *Russian Chemical Reviews*, 2014, vol. 85, no. 3, pp. 280-307. DOI: 10.1070/RCR4554.
3. Prabhakaran P.K., Catoire L., Deschamps J. Aluminium doping composite metal-organic framework by alane nanoconfinement: Impact on the room temperature hydrogen uptake, *Microporous and Mesoporous Materials*, 2017, vol. 243, pp. 214-220. DOI: 10.1016/j.micromeso.2017.02.032.
4. Zeraati M., Rahdar A., Medina D.I., Sargazi G. Synthesis of Al-based metal-organic framework in water with caffeic acid ligand and NaOH as linker sources with highly efficient anticancer treatment, *Frontiers in Chemistry*, 2021, vol. 9, art. no. 784461, 9 p. DOI: 10.3389/fchem.2021.784461.
5. Hu Z., Deibert B.J., Li J. Luminescent metal-organic frameworks for chemical sensing and explosive detection, *Chemical Society Reviews*, 2014, vol. 43, issue 16, pp. 5815-5840. DOI: 10.1039/c4cs00010b.
6. Sato H., Matsuda R., Sugimoto K., Takata M., Kitagawa S. Photoactivation of a nanoporous crystal for on-demand guest trapping and conversion, *Nature Materials*, 2010, vol. 9, pp. 661-666. DOI: 10.1038/nmat2808.
7. Zhang W., Xiong R.-G. Ferroelectric metal-organic frameworks, *Chemical Reviews*, 2012, vol. 112, issue 2, pp. 1163-1195. DOI: 10.1021/cr200174w.
8. Tu J., Song W.-L., Lei H. et al. Nonaqueous rechargeable aluminum batteries: progresses, challenges, and perspectives, *Chemical Reviews*, 2021, vol. 121, issue 8, pp. 4903-4961. DOI: 10.1021/acs.chemrev.0c01257.
9. Elia G.A., Kravchyk K.V., Kovalenko M.V. et al. An overview and prospective on Al and Al-ion battery technologies, *Journal of Power Sources*, 2021, vol. 481, art. no. 228870, 22 p. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2020.228870.
10. Barea E., Montoro C., Navarro J. Toxic gas removal – metal-organic frameworks for the capture and degradation of toxic gases and vapours, *Chemical Society Reviews*, 2014, vol. 43, issue 16, pp. 5419-5430. DOI: 10.1039/c3cs60475f.
11. Xiao B., Wheatley P.S., Zhao X. et al. High-capacity hydrogen and nitric oxide adsorption and storage in a metal-organic framework, *Journal of the American Chemical Society*, 2007, vol. 129, issue 5, pp. 1203-1209. DOI: 10.1021/ja066098k.
12. Horcajada P., Chalati T., Serre C. et al. Porous metal-organic-framework nanoscale carriers as a potential platform for drug delivery and imaging, *Nature Materials*, 2010, vol. 9, pp. 172-178. DOI: 10.1038/nmat2608.
13. Horcajada P., Gref R., Baati T. et al. Metal-organic frameworks in biomedicine, *Chemical Reviews*, 2012, vol. 112, issue 2, pp. 1232-1268. DOI: 10.1021/cr200256v.
14. Bloch E.D., Queen W.L., Chavan S. et al. Gradual release of strongly bound nitric oxide from $\text{Fe}_2(\text{NO})_2$, *Journal of the American Chemical Society*, 2015, vol. 137, issue 10, pp. 3466-3469. DOI: 10.1021/ja5132243.
15. Qiu S., Xue M., Zhu G. Metal-organic framework membranes: from synthesis to separation application, *Chemical Society Reviews*, 2014, vol. 43, issue 16, pp. 6116-6140. DOI: 10.1039/C4CS00159A.
16. Rodenas T., Luz I., Prieto G. et al. Metal-organic framework nanosheets in polymer composite materials for gas separation, *Nature Materials*, 2015, vol. 14, pp. 48-55. DOI: 10.1038/nmat4113.
17. Gabuda S.P., Kozlova S.G., Dybtsev D.N., Fedin V.P. Supramolecular interactions and structural transformations in the metal-organic sorbent-acetone nanoreactor system, *Journal of Structural Chemistry*, 2009, vol. 50, issue 5, pp. 887-894. DOI: 10.1007/s10947-009-0132-x.

18. Gabuda S.P., Kozlova S.G., Samsonenko D.G., Dybtsev D.N., Fedin V.P. Quantum rotations and chiral polarization of qubit prototype molecules in a highly porous metal–organic framework: ^1H NMR T_1 study, *Journal of Physical Chemistry C*, 2011, vol. 115, issue 42, pp. 20460-20465. DOI: 10.1021/jp206725k.
19. Xu X., Cao R., Jeong S., Cho J. Spindle-like mesoporous $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ anode material prepared from MOF template for high-rate lithium batteries, *Nano Letters*, 2012, vol. 12, issue 9, pp. 4988-4991. DOI: 10.1021/nl302618s.
20. Yang S.J., Nam S., Kim T. et al. Preparation and exceptional lithium anodic performance of porous carbon-coated ZnO quantum dots derived from a metal-organic framework, *Journal of the American Chemical Society*, 2013, vol. 135, issue 20, pp. 7394-7397. DOI: 10.1021/ja311550t.
21. Langseth E., Swang O., Arstad B. et al. Synthesis and characterization of Al@MOF materials, *Materials Chemistry and Physics*, 2019, vol. 226, pp. 220-225. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2019.01.009.
22. Manikoth M., Kannan S.K., Gladis J.M., Rajan T.P.D. Aluminium alloys and composites for electrochemical energy systems, *Progress in Materials Science*, 2024, vol. 146, art. no. 101322, 89 p. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2024.101322.
23. Lin M.-C., Gong M., Lu B. et al. An ultrafast rechargeable aluminium-ion battery, *Nature*, 2015, vol. 520, pp. 325-328. DOI: 10.1038/nature14340.
24. Miller W.S., Zhuang L., Bottema J. et al. Recent development in aluminium alloys for the automotive industry, *Materials Science and Engineering: A*, 2000, vol. 280, issue 1, pp. 37-49. DOI: 10.1016/S0921-5093(99)00653-X.
25. Apekov A.M., Shebzukhova I.G. Orientatsionnaya zavisimost' mezhfaznoj energii nizkotemperaturnoj modifikatsii titana na granitse s organicheskoy zhidkost' [Orientational dependence of the interphase energy of low-temperature modification of titanium at the boundary with an organic liquid], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2022, issue 14, pp. 17-23. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.017.
26. Apekov A.M., Shebzukhova I.G. Interface energy of crystal faces of IIA-type metals at boundaries with nonpolar organic liquids, allowing for dispersion and polarization corrections, *Bulletin of Russian Academy of Science. Physics*, 2019, vol. 83, issue 6, pp. 760-763. DOI: 10.3103/S1062873819060078.
27. Apekov A.M., Shebzukhova I.G. Polarization correction to the interfacial energy of faces of alkali metal crystals at the borders with a nonpolar organic liquid, *Bulletin of Russian Academy of Science. Physics*, 2018, vol. 82, issue 7, pp. 789-792. DOI: 10.3103/S1062873818070067.
28. Apekov A.M., Shebzukhova I.G. Poliarizatsionnaya i dispersionnaya popravki k mezhfaznoj energii granej kristallov nizkotemperaturnykh modifikatsij kal'tsiya i bariya na granitse s nepolyarnymi organicheskimi zhidkostyami [Polarization and dispersion corrections to the interfacial energy of the facets at the boundary between calcium/barium crystals and nonpolar organic liquids], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2018, issue 10, pp. 20-26. DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.020.
29. Shebzukhova I.G., Apekov A.M., Khokonov Kh.B. Orientation dependence of the interfacial energies of chromium and α -iron crystals at boundaries with nonpolar organic liquids, *Bulletin of Russian Academy of Science. Physics*, 2017, vol. 81, issue 5, pp. 605-607. DOI: 10.3103/S1062873817050173.
30. Shebzukhova I.G., Apekov A.M., Khokonov Kh.B. Anisotropy of the interface energy of IA and IB metals at a boundary with organic liquids, *Bulletin of Russian Academy of Science. Physics*, 2016, vol. 80, issue 6, pp. 657-659. DOI: 10.3103/S1062873816060307.
31. Apekov A.M., Shebzukhova I.G. Vklad dispersionnogo vzaimodejstviya v mezhfaznuyu energiyu kristallov kobal'ta na granitse s nepolyarnymi organicheskimi zhidkostyami [Contribution of the dispersion interaction to the interface energy of cobalt crystals at the boundary with nonpolar organic liquids], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2023, issue 15, pp. 231-238. DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.231.

Original paper

Interphase energy of aluminum crystals at the boundary with nonpolar organic liquids

A.M. Apekov¹, I.G. Shebzukhova², L.A. Khamukova¹

¹North-Caucasus Center for Mathematical Research, North-Caucasus Federal University, Stavropol, Russia

²Kabardino-Balkarian State University named after H.M. Berbekov, Nalchik, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.318

Abstract: Understanding the energy characteristics at the metal-organic interface is of great importance for the development of equipment and technologies in various industries. In this regard,

there is a great interest in studying the processes occurring at this interface. Particularly noteworthy is the rapid growth of studies on the properties of metal-organic framework structures, which is associated with the possibility of synthesizing these structures with the desired properties by varying the lengths of the organic molecules connecting the atoms of metals or their oxides, as well as by selecting the chemical composition. In this paper, the values of the interfacial energy at the boundaries of the faces of an aluminum crystal with organic liquids are obtained within the framework of the electron-statistical method, taking into account the polarization of metal ions and molecules of the organic liquid, as well as the dispersion interaction of Wigner-Seitz cells on the interface. The dependence of the interfacial energy and corrections to the interfacial energy on the permittivity of the liquid and the orientation of the metal crystal is obtained. It is found that the dispersion correction makes a positive contribution while the polarization correction reduces the interfacial energy.

Keywords: interphase energy, polarization correction, dispersion correction, electronic statistical method, nonpolar organic liquid, aluminum.

Апеков Аслан Мартинович – к.ф.-м.н., заместитель директора по научной работе, Региональный научно-образовательный математический центр «Северо-Кавказский центр математических исследований» ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»

Шебзухова Ирина Гусейновна – д.ф.-м.н., профессор, профессор кафедры теоретической и экспериментальной физики Института физики и математики ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова»

Хамукова Лиана Амурбековна – к.ф.-м.н., старший научный сотрудник отдела математической физики «Северо-Кавказский центр математических исследований» Северо-Кавказский федеральный университет»

Aslan M. Apekov – Ph. D., Deputy Director, North-Caucasus Center for Mathematical Research, North-Caucasus Federal University

Irina G. Shebzukhova – Dr. Sc., Professor, Professor of the Department of Theoretical and Experimental Physics, Institute of Physics and Mathematics, Kabardino-Balkarian State University named after H.M. Berbekov

Liana A. Khamukova – Ph. D., Senior Researcher, Department of Mathematical Physics, North-Caucasus Center for Mathematical Research, North-Caucasus Federal University

Поступила в редакцию/received: 27.08.2024; после рецензирования/revised: 20.09.2024; принята/accepted: 23.09.2024.