

**ВКЛАД ДИСПЕРСИОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В
МЕЖФАЗНУЮ ЭНЕРГИЮ КРИСТАЛЛОВ КОБАЛЬТА НА
ГРАНИЦЕ С НЕПОЛЯРНЫМИ ОРГАНИЧЕСКИМИ
ЖИДКОСТЯМИ**

А.М. Апеков¹, И.Г. Шебзухова²

¹*Региональный научно-образовательный математический центр
«Северо-Кавказский центр математических исследований»
ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»
355017, Россия, Ставрополь, ул. Пушкина 1*

²*ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный университет
им. Х.М. Бербекова»*

*360004, Россия, Кабардино-Балкарская республика, Нальчик, ул. Чернышевского, 173
aslkbisu@yandex.ru, irina.shebzukhova@mail.ru*

DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.231

Аннотация: Активное внедрение устройств основанных на применении свойств межфазной границы металл-органическое вещество вызывает интерес к исследованиям характеристик данной границы, особенно большой интерес представляют металл-органические каркасные структуры. Синтез данных структур с необходимыми свойствами возможен благодаря тому, что можно варьировать как элементный состав в активных металлоцентрах, так и связывающие эти центры органические лиганды. В связи с этим, на первый план выходит необходимость понимания свойств и характера взаимодействия на границе металла с органическими веществами. В данной работе в рамках электронно-статистического метода получен вклад дисперсионного взаимодействия ячеек Вигнера-Зейтца в межфазную энергию кобальта на границе с неполярными органическими жидкостями. Установлены зависимости дисперсионного вклада от ориентации металлического кристалла и диэлектрической проницаемости органической жидкости. Показано, что дисперсионный вклад увеличивает межфазную энергию, а с ростом диэлектрической проницаемости жидкости величина вклада уменьшается.

Ключевые слова: межфазная энергия, дисперсионный вклад, электронно-статистический метод, неполярная органическая жидкость, кобальт.

1. Введение

Исследование характеристик границы металлов с органикой в последнее время актуализировалось благодаря росту работ по созданию и применению металл-органических каркасных структур (Metal-Organic Frameworks – MOF). Металл-органические каркасные структуры имеют модульное строение в связи с чем имеется огромное разнообразие возможных структур, что позволяет создавать материалы с необходимыми свойствами. При формировании металл-органических каркасных структур есть возможность варьировать элементный состав, топологию, пористость (варьируя длину органических лигандов, можно целенаправленно изменять размеры пор), что позволяет получать наиболее подходящие материалы на их основе и применять во многих областях [1, 2]: для разделения и очистки

газов [3-9]; создания материалов для поглощения и нейтрализации токсичных газов [9]; для адресной доставки лекарственных препаратов [10-13]; для разработки оптических и люминесцентных [14-16], фотоактивных [17], магнитных материалов [18, 19]; в фотокатализе [20]; для получения соединений, в которых используются квантовые свойства включенных фаз [21, 22] и др. Также пористые металл-органические каркасные структуры могут быть использованы в качестве матрицы при получении наночастиц оксидов металлов [23] и квантовых точек [24].

Исследования характеристик межфазной границы кобальта с органикой представляют значительный интерес, в связи с возможностью практического применения. Так в работе [25] получен нанокомпозит в процессе термолиза металл-органической каркасной структуры из которого изготовлены электроды для суперконденсаторов с размерами пор 10 нм, содержащий в активных центрах кобальт, что позволило достичь высокую удельную емкость и характеризуется хорошей устойчивостью к перезарядке.

В данной работе в рамках электронно-статистической теории межфазной энергии металла на границе с неполярными органическими жидкостями [26-31] ставилась цель оценить вклад дисперсионного взаимодействия ячеек Вигнера-Зейтца в межфазную энергию граней низкотемпературной модификации кобальта на границе с неполярными органическими жидкостями.

2. Основные формулы и результаты вычислений

Расчет влияния дисперсионных сил на межфазную энергию граней ряда металлических кристаллов на границе с органическими жидкостями нами был сделан в [26-31]. Рассчитать молекулярное притяжение конденсированных фаз на основе коллективной модели – флуктуаций поля излучения – и выразить силу и энергию взаимодействия через макроскопические константы вещества позволяет теория Е.М. Лифшица [30]. Вклад дисперсионных сил притяжения и сил отталкивания в межфазную энергию находится, согласно формуле Борна

$$f_{\omega 12}^{(g)} = -W(H_0)/2, \quad (1)$$

где $W(H_0)$ – энергия дисперсионного взаимодействия двух однородных бесконечно-протяженных параллельных стенок, H_0 – равновесное расстояние между стенками. Выбор границы раздела между металлом и неполярной органической жидкостью проводится в рамках электронно-статистического метода [27, 31]

$$H_0 \approx 2R \left(1 - \frac{r - x_G(\varepsilon)}{R} \right), \quad (2)$$

где r – радиус иона металла, $x_G(\varepsilon)$ – координата поверхности Гиббса (функция макроскопической диэлектрической проницаемости органической жидкости ε).

Энергия дисперсионного взаимодействия двух однородных бесконечно-протяженных параллельных стенок (в расчете на единицу площади), находящихся на расстоянии H друг от друга (когда $H \leq \lambda_0$, где λ_0 – длина волны наиболее интенсивной линии в их абсорбционном спектре), согласно теории Лифшица, выражается формулой:

$$W(H) \approx -\frac{\hbar}{16\pi^2 H^2} \int_0^\infty \left(\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 1} \right)^2 d\xi, \quad (3)$$

где $\varepsilon(i\xi) = \varepsilon'(\omega) + i\varepsilon''(\omega)$ – комплексная диэлектрическая проницаемость, $\varepsilon'(\omega)$ – дисперсия диэлектрической проницаемости, $\varepsilon''(\omega)$ – дисперсия диэлектрических потерь.

Точный расчет $W(H)$ при $H \ll \lambda$ возможен, если известен абсорбционный спектр вещества, но для приближенной оценки дисперсионной части адгезии между металлами, достаточно будет воспользоваться классической металлооптикой Друде-Зинера-Кронига. Таким образом можно получить для энергии дисперсионного взаимодействия:

$$W(H) = -\frac{\hbar}{64H^2} \left(\frac{2e^2}{\pi m^*} \right)^{1/2} \sqrt{\rho(\infty)}, \quad (4)$$

где $\rho(\infty) = z/\Omega = 3z/4\pi R^3$ – электронная плотность, z – среднее число свободных электронов на атом, Ω – объем ячейки Вигнера-Зейтца, e и m^* – заряд и эффективная масса электрона.

Кроме энергии дисперсионных сил притяжения надо учесть энергию Борновских сил отталкивания ячеек Вигнера-Зейтца вследствие перекрытия их ионных облаков, которую можно определить потенциалом вида $U = B/r^k$ ($k=12$).

Расчетную формулу для вклада дисперсионного взаимодействия ячеек Вигнера-Зейтца в межфазную энергию грани металлического кристалла на границе с неполярной органической жидкостью находим в виде [30]:

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

где f – коэффициент упаковки, зависящий от структуры металла, N – число Авогадро, A и D – атомная масса и плотность металла, $\gamma = m^*/m$, m – масса свободного электрона, R – радиус сферы равновеликой ячейки

Вигнера-Зейтца, $n(\varepsilon)$ – показатель степени в решении уравнения Томаса-Ферми [32], $n(hkil)$ – число частиц на единице площади поверхности металла.

По формуле (5) рассчитан дисперсионный вклад в межфазную энергию граней кристаллов низкотемпературной модификации кобальта с гексагональной плотноупакованной структурой на границе с неполярными органическими жидкостями – пентаном, гексаном, гептаном, октаном, деканом, нонаном, *n*-, *m*-, *o*-ксилолом, бензолом, толуолом (см. рис. 1).

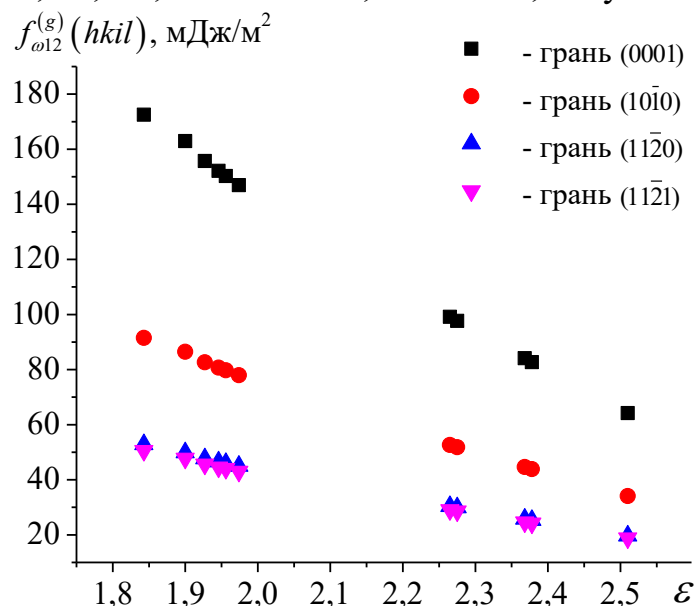


Рис. 1. Дисперсионный вклад в межфазную энергию граней кобальта на границе с неполярными органическими жидкостями при температуре 293 К.

3. Заключение

Дисперсионное взаимодействие ячеек Вигнера-Зейтца вносит положительный вклад в межфазную энергию α -кобальта на границе с неполярной органической жидкостью. Зависит от типа структуры и ориентации металлического кристалла, а также от диэлектрической проницаемости органической жидкости. Ориентационная зависимость дисперсионного вклада в межфазную энергию α -кобальта с ГПУ структурой на границе с неполярными диэлектрическими жидкостями имеет следующий вид: $f_{\omega_{12}}^{(g)}(0001) > f_{\omega_{12}}^{(g)}(10\bar{1}0) > f_{\omega_{12}}^{(g)}(11\bar{2}0) > f_{\omega_{12}}^{(g)}(11\bar{2}1)$.

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. **Li, J.-R.** Selective gas adsorption and separation in metal-organic frameworks / J.-R. Li, R.J. Kuppler,

- H.-C. Zhou. // *Chemical Society Reviews*. – 2009. – V. 38. – I. 5. – P. 1477-1504. DOI: 10.1039/B802426J.
4. **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.
5. **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.
6. **Britt, D.** Highly efficient separation of carbon dioxide by a metal-organic framework replete with open metal sites / D. Britt, H. Furukawa, B. Wang et al. // *Proceedings of the National Academy of Sciences USA*. – 2009. – V. 106. – I. 49. – P. 20637-20640. DOI: 10.1073/pnas.0909718106.
7. Pan, L. Separation of hydrocarbons with a microporous metal–organic framework / L. Pan, D.H. Olson, L.R. Ciemmolonski et al. // *Angewandte Chemie International Edition*. – 2006. – V. 45. – I. 4. – P. 616-619. DOI: 10.1002/anie.200503503.
8. **Matsuda, R.** Temperature responsive channel uniformity impacts on highly guest-selective adsorption in a porous coordination polymer / R. Matsuda, T. Tsujino, H. Sato et al. // *Chemical Science*. – 2010. – V. 1. – I. 3. – P. 315-321. DOI: 10.1039/C0SC00272K.
9. **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.
10. **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.
11. **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.
12. **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.
13. **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.
14. **Imbert, D.** Lanthanide 8-hydroxyquinoline-based podates with efficient emission in the NIR range / D. Imbert, S. Comby, A.-S. Chauvin, J.-C.G. Bunzli // *Chemical communications*. – 2005. – I. 11. – P. 1432-1434. DOI: 10.1039/B416575F.
15. **Heine, J.** Engineering metal-based luminescence in coordination polymers and metal–organic frameworks / J. Heine, K. Muller-Buschbaum // *Chemical Society Reviews*. – 2013. – V. 42. – I. 24. – P. 9232-9242. DOI: 10.1039/C3CS60232J.
16. **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.
17. **Sato, H.** Photoactivation of a nanoporous crystal for on-demand guest trapping and conversion/ H. Sato, R. Matsuda, K. Sugimoto et al. // *Nature materials*. – 2010. – V. 9. – P. 661-666. DOI: 10.1038/nmat2808.
18. **Yutkin, M.P.** Synthesis, structure and magnetic behavior of new 1D metal–organic coordination polymer with Fe₃O core / M.P. Yutkin, M.S. Zavakhina, A.V. Virovets et al. // *Inorganica Chimica Acta*. – 2011. – V. 365. – I. 1. – P. 513-516. DOI: 10.1016/j.ica.2010.10.015.
19. **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.
20. **Silva, C.G.** Water stable Zr–benzenedicarboxylate metal–organic frameworks as photocatalysts for hydrogen generation / C.G. Silva, I. Luz, F.X. Llabres i Xamena et al. // *Chemistry A European Journal*. – 2010. – V. 16. – I. 36. – P. 11133 -11138. DOI: 10.1002/chem.200903526.
21. **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.
22. **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 et al. // *Journal of Physical Chemistry C*. – 2011. – V. 115. – I. 42. – P. 20460-20465. DOI: 10.1021/jp206725k.
23. **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.
24. **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.
25. **Meng, F.L.** Porous Co₃O₄ materials prepared by solid-state thermolysis of a novel Co-MOF crystal and their superior energy storage performances for supercapacitors / F.L. Meng, Z.G. Fang, Z.X. Li et al. // *Journal of Materials Chemistry A*. – 2013. – V. 1. – I. 24. – P. 7235-7241. DOI: 10.1039/C3TA11054K.
26. **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. – V. 14. – P. 17-23. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.017.
27. **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.
28. **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.
29. **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.
30. **Шебзухова, И.Г.** Вклад дисперсионного взаимодействия s-сфер в межфазную энергию кристаллов α-Li и α-Na на границе с неполярными органическими жидкостями / И.Г. Шебзухова, А.М. Апеков // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2017. – I. 9. – P. 518-521. DOI: 10.26456/pcascnn/2017.9.518.
31. **Shebzukhova, I.G.** Orientation dependence of the interfacial energies of chromium and α-iron crystals at boundaries with nonpolar organic liquids / I.G. Shebzukhova, А.М. Апеков, Kh.B. Khokonov // *Bulletin of Russian Academy of Science. Physics*. – 2017. – V. 81. – I. 5. – P. 605-607. DOI: 10.3103/S1062873817050173.
32. **Shebzukhova, I.G.** Anisotropy of the interface energy of IA and IB metals at a boundary with organic liquids / I.G. Shebzukhova, А.М. Апеков, Kh.B. Khokonov // *Bulletin of Russian Academy of Science. Physics*. – 2016. – V. 80. – I. 6. – P. 657-659. DOI: 10.3103/S1062873816060307.

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. Li J.-R., Kuppler R.J., Zhou H.-C. Selective gas adsorption and separation in metal-organic frameworks, *Chemical Society Reviews*, 2009, vol. 38, issue 5, pp. 1477-1504. DOI: 10.1039/B802426J.
4. 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.
5. 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.
6. Britt D., Furukawa H., Wang B. et al. Highly efficient separation of carbon dioxide by a metal-organic framework replete with open metal sites, *Proceedings of the National Academy of Sciences USA*, 2009, vol. 106, issue 49, pp. 20637-20640. DOI: 10.1073/pnas.0909718106.
7. Pan L., Olson D.H., Ciemnomolonski L.R. et al. Separation of hydrocarbons with a microporous metal-organic framework, *Angewandte Chemie International Edition*, 2006, vol. 45, issue 4, pp. 616-619. DOI: 10.1002/anie.200503503.
8. Matsuda R., Tsujino T., Sato H. et al. Temperature responsive channel uniformity impacts on highly guest-selective adsorption in a porous coordination polymer, *Chemical Science*, 2010, vol. 1, issue 3, pp. 315-321. DOI: 10.1039/C0SC00272K.
9. 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.
10. 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.
11. 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.
12. 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.
13. Bloch E.D., Queen W.L., Chavan S. et al. Gradual release of strongly bound nitric oxide from Fe₂(NO)₂, *Journal of the American Chemical Society*, 2015, vol. 137, issue 10, pp. 3466-3469. DOI: 10.1021/ja5132243.
14. Imbert D., Comby S., Chauvin A.-S., Bunzli J.-C.G. Lanthanide 8-hydroxyquinoline-based podates with efficient emission in the NIR range, *Chemical Communications*, 2005, issue 11, pp. 1432-1434. DOI: 10.1039/B416575F.
15. Heine J., Muller-Buschbaum K. Engineering metal-based luminescence in coordination polymers and metal–organic frameworks, *Chemical Society Reviews*, 2013, vol. 42, issue 24, pp. 9232-9242. DOI: 10.1039/C3CS60232J.
16. 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.
17. Sato H., Matsuda R., Sugimoto K. et al. Photoactivation of a nanoporous crystal for on-demand guest trapping and conversion, *Nature materials*, 2010, vol. 9, pp. 661-666. DOI: 10.1038/nmat2808.
18. Yutkin M.P., Zavakhina M.S., Virovets A.V. et al. Synthesis, structure and magnetic behavior of new 1D metal–organic coordination polymer with Fe₃O core, *Inorganica Chimica Acta*, 2011, vol. 365, issue 1, pp. 513-516. DOI: 10.1016/j.ica.2010.10.015.
19. Zhang W., Xiong R.-G. Ferroelectric metal–organic frameworks, *Chemical Reviews*, 2012, vol. 112, issue 2, pp. 1163-1195. DOI: 10.1021/cr200174w.
20. Silva C.G., Luz I., Llabres i Xamena F.X. et al. Water stable Zr–benzenedicarboxylate metal–organic frameworks as photocatalysts for hydrogen generation, *Chemistry A European Journal*, 2010, vol. 16, issue 36, pp. 11133 -11138. DOI: 10.1002/chem.200903526.
21. 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.
22. Gabuda S.P., Kozlova S.G., Samsonenko D.G. et al. Quantum rotations and chiral polarization of qubit prototype molecules in a highly porous metal–organic framework: ¹H NMR T₁ study, *Journal of Physical Chemistry C*, 2011, vol. 115, issue 42, pp. 20460-20465. DOI: 10.1021/jp206725k.
23. Xu X., Cao R., Jeong S., Cho J. Spindle-like mesoporous α-Fe₂O₃ 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.
24. 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.
25. Meng F.L., Fang Z.G., Li Z.X. et al. Porous Co₃O₄ materials prepared by solid-state thermolysis of a novel Co-MOF crystal and their superior energy storage performances for supercapacitors, *Journal of Materials Chemistry A*, 2013, vol. 1, issue 24, pp. 7235-7241. DOI: 10.1039/C3TA11054K.
26. Apekov A.M., Shebzukhova I.G. Orientatsionnaya zavisimost' mezhfaznoj energii nizkotemperaturnoj modifikatsii titana na granitse s organicheskoj 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.
27. 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.
28. 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.
29. Apekov A.M., Shebzukhova I.G. Polyarizatsionnaya 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.
30. Shebzukhova I.G., Apekov A.M. Vklad dispersionnogo vzaimodejstviya s-sfer v mezhfaznuyu energiyu kristallov α - Li i α - Na na granitse s nepolyarnymi organicheskimi zhidkostyami [Contribution of dispersion interaction of s-spheres into the interfacial energy of α - Li and α - Na crystals bounding non-polar organic liquid

boundary], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2017, issue 9, pp. 518-521. DOI: 10.26456/pcascnn/2017.9.518.

31. 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.

32. 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.

Short Communication

**CONTRIBUTION OF THE DISPERSION INTERACTION TO THE INTERFACE ENERGY
OF COBALT CRYSTALS AT THE BOUNDARY WITH NONPOLAR ORGANIC LIQUIDS**

A.M. Apekov¹, I.G. Shebzukhova²

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

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

DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.231

Abstract: The active implementation of devices based on the use of the properties of the metal-organic interface makes it important to study characteristics of such interfaces, especially of the metal-organic framework structures. The creation of these structures with the necessary properties is possible since one can vary the elemental composition in the active metal centers as well as the organic ligands binding these centers. In this regard, understanding the properties and nature of the interaction at the interface of a metal with organic substances becomes of primary interest. In this work, within the framework of the electron-statistical method, a correction to the interfacial energy of cobalt at the interface with non-polar organic liquids for the dispersion interaction of the Wigner-Seitz cells is obtained. The dependences of the dispersion correction on the orientation of the metal crystal and the permittivity of the organic liquid are determined. It is shown that the contribution of the dispersion correction to the interfacial energy is positive and decreases with an increase of the permittivity of the liquid.

Keywords: *interfacial energy, dispersion contribution, electron-statistical method, non-polar organic liquid, cobalt.*

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»

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

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

Поступила в редакцию/received: 17.08.2023; после рецензирования/revised: 12.09.2023; принята/accepted: 15.09.2023.