3. ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ И АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

УДК 538.971 *Краткое сообщение*

Зависимость межфазной энергии граней молибдена на границе с органическими жидкостями от диэлектрической проницаемости

А.М. Апеков[1], И.Г. Шебзухова[2], Л.А. Хамукова[1]

[1]Региональный научно-образовательный математический центр «Северо-Кавказский центр математических исследований» ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»

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

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

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

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

DOI: 10.26456/pcascnn/2026.18.332

Аннотация: Исследование межфазной энергии молибдена на границе с органическими жидкостями представляет значительный интерес для развития современных технологий в энергетике, катализе, материаловедении и биомедицине. Молибден, обладая высокой тугоплавкостью, механической прочностью и выраженной каталитической активностью, широко применяется в составе функциональных материалов, включая металл-органические каркасные структуры, композиты и гетерогенные катализаторы. Понимание энергетических характеристик на границе металл-органическое вещество критически важно для оптимизации процессов адсорбции, смачивания, формирования прочных межфазных контактов и управления реакционной способностью активных центров. В настоящей работе в рамках электронно-статистического метода выполнены расчёты межфазной энергии молибдена на границе кристаллографических граней с неполярными органическими жидкостями. Учтено дисперсионное взаимодействие ячеек Вигнера–Зейтца, осцилляция электронной плотности в переходном слое, а также поляризация поверхностных ионов металла и молекул органической жидкости в поле полубесконечного металла. Установлены зависимости межфазной энергии и поправок от ориентации кристаллической решётки молибдена и диэлектрической проницаемости органической жидкости. Показано, что дисперсионная и осцилляционная поправки увеличивают межфазную энергию, тогда как поляризационная поправка снижает её. Наибольшее значение межфазной энергии имеет грань (110), а наименьшее грань (111).

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

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

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

Хамукова Лиана Амурбековна – к.ф.-м.н., старший научный сотрудник регионального научно-образовательного математического центра «Северо-Кавказский центр математических исследований» ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»

Short Communication

Dependence of the interfacial energy of molybdenum faces at the boundary with organic liquids on the dielectric constant

A.M. Apekov[1], I.G. Shebzukhova[2], L.A. Khamukova[1]

[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/2026.18.332

Abstract: The study of the interfacial energy of molybdenum at the interface with organic liquids is of

© А.М. Апеков, И.Г. Шебзухова, Л.А. Хамукова, 2026

considerable interest for the development of modern technologies in energy, catalysis, materials science and biomedicine. Molybdenum, having high refractoriness, mechanical strength, and pronounced catalytic activity, is widely used in functional materials, including metal-organic skeleton structures, composites, and heterogeneous catalysts. Understanding energy characteristics at the metal-organic interface is critically important for optimizing the processes of adsorption, wetting, formation of strong interfacial contacts and control of the reactivity of active centers. In this work, calculations of the interfacial energy of molybdenum at the boundary of crystallographic faces with nonpolar organic liquids are performed using the electron statistical method. The dispersion interaction of Wigner–Seitz cells, the oscillation of the electron density in the transition layer, and the polarization of surface metal ions and organic liquid molecules in the field of a semi-infinite metal are taken into account. The dependences of the interfacial energy and corrections on the orientation of the molybdenum crystal lattice and the dielectric constant of an organic liquid are established. It is shown that the dispersion and oscillation corrections increase the interphase energy, while the polarization correction reduces it. The face (110) has the highest value of the interphase energy, and the face (111) has the lowest value of it.
Keywords: molybdenum, interfacial energy, polarization correction, dispersion correction, electron statistical method, nonpolar organic liquid.

Aslan M. Apekov – Ph. D., Deputy Director, North-Caucasus Center for Mathematical Research, North-Caucasus Federal University, ORCID: 0000-0002-6269-3717
Irina G. Shebzukhova – Dr. Sc., Professor, Professor of the Department of Theoretical and Experimental Physics, Institute of Mathematics and Natural Sciences, Kabardino-Balkarian State University named after H.M. Berbekov, ORCID: 0000-0002-1532-1873
Liana A. Khamukova – Ph. D., Senior Researcher, North-Caucasus Center for Mathematical Research, North-Caucasus Federal University, ORCID: 0000-0002-7830-7614

Поступила в редакцию/received: 28.07.2026; после рецензирования/revised: 02.09.2026; принята/accepted 03.09.2026.

1. Введение

Молибден – один из ключевых тугоплавких металлов, обладающий уникальным сочетанием физико-химических свойств: высокой температурой плавления, значительной механической прочностью, выраженной каталитической активностью и хорошей электропроводностью. Благодаря этим характеристикам молибден и его соединения находят широкое применение в различных высокотехнологичных областях – от авиакосмической и энергетической промышленности до катализа, электрохимии и биомедицины. В частности, молибден активно используется в составе гетерогенных катализаторов [1, 2], электродов суперконденсаторов [3] и аккумуляторов [4], а также в металл-органических каркасных структурах (MOF – metal-organic frameworks) [5-7], где он может выступать как в роли металлоцентра, так и в виде функциональных добавок, придающих материалу требуемые свойства. Возможность целенаправленного варьирования элементного состава и топологии MOF позволяет создавать материалы с заданной пористостью, селективностью и стабильностью, что делает их особенно перспективными для задач адсорбции, разделения газов [8-11], очистки воды и доставки лекарственных средств [12-16].

Особую значимость в контексте проектирования таких материалов

приобретает понимание характеристик межфазной границы металл – органическое вещество. Энергетические параметры этой границы – в частности, межфазная энергия (МЭ) – определяют смачиваемость, адгезию, стабильность дисперсных систем, а также эффективность переноса заряда и массопереноса в пористых средах. Для молибдена эти характеристики особенно важны, поскольку его применение часто связано с экстремальными условиями (высокие температуры, агрессивные среды), где стабильность межфазных контактов напрямую влияет на долговечность и производительность устройств. Несмотря на значительный интерес к молибденсодержащим материалам, систематические данные о межфазной энергии молибдена на границе с органическими жидкостями остаются ограниченными, а имеющиеся оценки зачастую получены косвенными методами или относятся к узкому кругу модельных систем [17, 18]. Это создаёт существенный пробел в теоретическом описании поведения молибдена в контакте с органическими средами и затрудняет прогнозирование свойств композиционных материалов на его основе.

Целью работы является оценка межфазной энергии граней молибдена на границе с неполярными органическими жидкостями с учетом поляризационной, дисперсионной и осцилляционной поправок, установление влияния на межфазную энергию кристаллической ориентации и диэлектрической проницаемости жидкости в рамках электронно-статистической теории [19-22].

2. Основные формулы и результаты вычислений

Межфазная энергия на границе металл-органическая жидкость при температуре T:

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

Внутренний $f_{\omega 12}^{(0i)}(hkl)$ и внешний $f_{\omega 12}^{(0e)}(hkl)$ вклады в МЭ определяются с учетом потенциала и хода электронной плотности вблизи границы раздела металл-органическая жидкость, которые находятся из решения уравнения Томаса-Ферми для внутренней и внешней областей металла с учетом макроскопической диэлектрической проницаемости жидкости.

Для нахождения поляризационной поправки $f_{\omega 12}^{p}(hkl)$ учитывается поляризация металлических ионов переходного слоя и поляризация молекул органической жидкости [23]. При оценке дисперсионной поправки $f_{\omega 12}^{g}(hkl)$ учитывается энергия дисперсионных сил притяжения и энергия Борновских сил отталкивания ячеек Вигнера-Зейтца вследствие перекрытия ионных облаков [24].

Вклад в МЭ осцилляции электронной плотности в периодическом

поле кристаллической решетки определяется в виде

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

где z – число свободных электронов на атом, N_A – число Авогадро, f – множитель зависящий от координационного числа металлического кристалла, D – плотность металла, A – атомный вес, $n(hkl)$ – концентрация частиц на грани металлического кристалла.

При оценке температурного вклада в МЭ $\Delta f_{\omega 12}^{T}(hkl)$ учитывалась ангармоничность колебаний ионной компоненты металла и температурное размытие уровня Ферми [25].

По формуле (1) проведена оценка межфазной энергии плотноупакованных граней молибдена на границе с неполярными органическими жидкостями (пентаном, гексаном, гептаном, октаном, деканом, нонаном, *п*–, *м*–, *о*–ксилолом, бензолом, толуолом) с учетом поправок. На рис. 1 показана зависимость вклада поляризационной поправки в МЭ от диэлектрической проницаемости органической жидкости.

Поляризационная поправка вносит отрицательный вклад в МЭ и при возрастании диэлектрической проницаемости жидкости по модулю снижается (см. рис. 1). При этом следует отметить, что основная доля вклада связана с поляризацией металлических ионов переходного слоя, а поляризация молекул органической жидкости вносит несущественный вклад. Наибольшее значение по величине имеет грань (110), а наименьшее – (111).

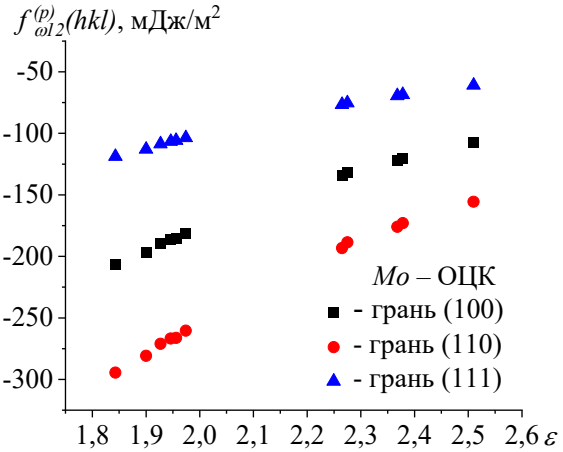

Рис. 1. Зависимость поляризационной поправки к межфазной энергии граней молибдена от диэлектрической проницаемости органической жидкости.

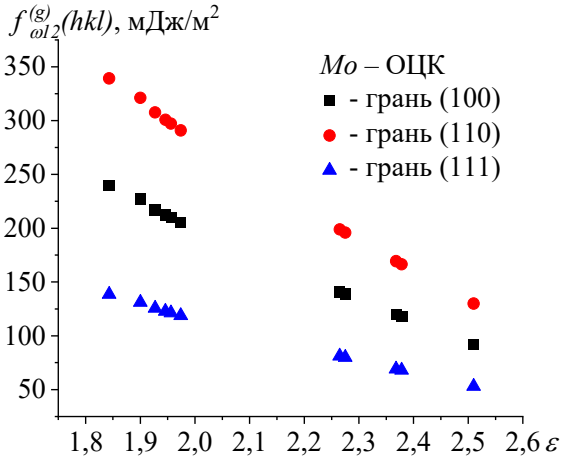

Рис. 2. Дисперсионная поправка к межфазной энергии граней молибдена на границе с неполярными органическими жидкостями.

Дисперсионное взаимодействие вносит положительный вклад в МЭ и с увеличением диэлектрической проницаемости жидкости дисперсионная поправка линейно снижается, принимая наибольшее

значение для грани (110), а наименьшее для грани (111) (см. рис. 2).

По формуле (2) рассчитан вклад, связанный с осцилляцией электронной плотности в периодическом поле кристаллической решетки, и для разных граней кристалла молибдена принимает значения: грань (100) – 3,78 мДж/м^2; грань (110) – 5,35 мДж/м^2; грань (111) – 2,18 мДж/м^2.

По формуле (1) проведена численная оценка МЭ граней молибдена на границе с неполярными органическими жидкостями и установлена зависимость от диэлектрической проницаемости жидкости (см. рис. 3).

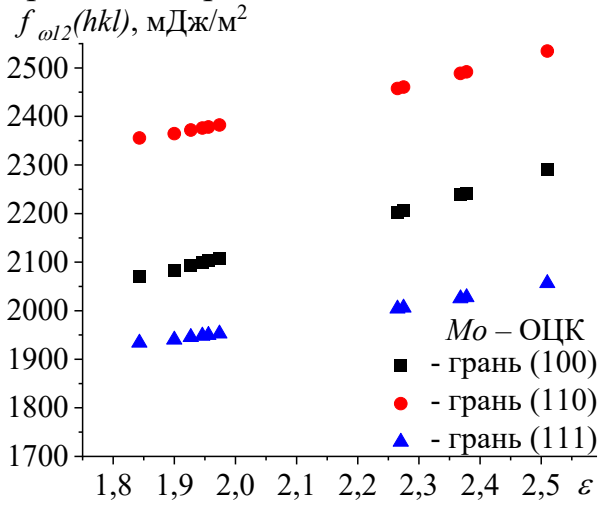

Рис. 3. Зависимость межфазной энергии граней молибдена от диэлектрической проницаемости органической жидкости.

Величина МЭ зависят от ориентации граней: $f_{\omega 12}(110) > f_{\omega 12}(100) > f_{\omega 12}(111)$ и с увеличением диэлектрической проницаемости органической жидкости линейно возрастает.

3. Заключение

Проведена численная оценка МЭ плотноупакованных граней молибдена на границе с неполярными органическими жидкостями с учетом поправок и установлены зависимости от диэлектрической проницаемости жидкостей и ориентации кристаллической решетки. Поляризационная, дисперсионная и осцилляционная поправки к МЭ молибдена на границе с диэлектрической жидкостью существенно зависят от ориентации кристаллической грани. Дисперсионная поправка вносит положительный вклад, поляризационная – отрицательный и с увеличением диэлектрической проницаемости органической жидкости дисперсионная поправка линейно убывает, а поляризационная – увеличивается.

Библиографический список:

1. **Gupta, S**. Advances in molybdenum enriched MOF derived nano-composites for applications outside energy research / S. Gupta // Discover Materials. – 2025. – V. 5. – I. 1. – Art. № 262. – 12 p. DOI: 10.1007/s43939-025-00447-9.

2. **Fan**, **Q.** Recent progress of molybdenum-based nitrides/carbides catalysts for lithium-sulfur batteries / Q. Fan,

H. Song, B. Gao et al. // Energy Materials. – 2025. – V. 5. – I. 9. – Art. № 500105. – 25 p. DOI: 10.20517/energymater.2025.33.
3. **Chen, Y.H.** Molybdenum-functionalized metal–organic framework crystals interconnected by carbon nanotubes as negative electrodes for supercapacitors / Y.H. Chen, C.H. Shen, T.E. Chang et al. // MRS Energy and Sustainability. – 2022. – V. 9. – I. 2. – P. 332-341. DOI: 10.1557/s43581-022-00034-y.
4. **Li,** Z. Lithiated metallic molybdenum disulfide nanosheets for high-performance lithium–sulfur batteries / Z. Li, I. Sami, J. Yang et al. // Nature Energy. – 2023. V. 8. – P. 84-93. DOI: 10.1038/s41560-022-01175-7.
5. **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.
6. **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. – I. 3. – P. 280-307. DOI: 10.1070/RCR4554.
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. **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.
9. **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.
10. **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.
11. **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.
12. **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.
13. **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.
14. **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.
15. **Yang, S**. Coupling metal organic frameworks with molybdenum disulfide nanoflakes for targeted cancer theranostics / S. Yang**,** D. Li, L. Chen et al. // Biomaterials Science. – 2021. – V, 9. – I. 9. – P. 3306-3318. DOI: 10.1039/d0bm02012e.
16. **Karami, M.** The progress of molybdenum disulfide 2D nanosheets as bionanocarriers for drug delivery systems: a groundbreaking approach with multiple therapeutic applications / M. Karami, O.M. Jazani // Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials. – 2025. – V. 35. – I. 9. – P. 7129-7158. DOI: 10.1007/s10904-025-03735-2.
17. **Jin**, **H.S.** Evaluation of surface energy and its anisotropy for bcc transition metals by modified embedded atom method / H.S. Jin, K.S. Ri, Y.M. Choe, H. Yang // Indian Journal of Physics. – 2022. – V. 96. – I. 11. – P. 3099-3104. DOI: 10.1007/s12648-021-02237-4.
18. Li, **C**. Theoretical and experimental grain boundary energies in body-centered cubic metals / C. Li, S. Lu, S. Divinski, L. Vitos. // Acta Materialia – 2023. – V. 255. – Art. № 119074. – 15 p. DOI: 10.1016/j.actamat.2023.119074.
19. **Апеков, А.М.** Ориентационная зависимость межфазной энергии низкотемпературной модификации титана на границе с органической жидкость / 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.
20. **Apekov, A.M.** Interface energy of crystal faces of IIA-type metals at boundaries with nonpolar organic liquids, allowing for dispersion and polarization corrections / A.M. Apekov, I.G. Shebzukhova // Bulletin of Russian Academy of Science. Physics. – 2019. – V. 83. – I. 6. – P. 760-763. DOI: 10.3103/S1062873819060078.
21. **Апеков, А.М.** Межфазная энергия кристаллов алюминия на границе с неполярными органическими жидкостями / А.М. Апеков, И.Г. Шебзухова, Л.А. Хамукова // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2024. – Вып. 16. – С. 318-326. DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.318.
22. **Апеков, А.М.** Межфазная энергия кристаллов палладия на границе с неполярными органическими жидкостями / А.М. Апеков, И.Г. Шебзухова, Л.А. Хамукова // Физико-химические аспекты изучения

кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2025. – Вып. 17. – С. 250-258. DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.250.
23. **Apekov, A.M.** Polarization correction to the interfacial energy of faces of alkali metal crystals at the borders with a nonpolar organic liquid / A.M. Apekov, I.G. Shebzukhova // Bulletin of Russian Academy of Science. Physics. – 2018. – V. 82. – I. 7. – P. 789-792. DOI: 10.3103/S1062873818070067.
24. **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. – Вып. 15. – С. 231-238. DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.231.
25. **Апеков, А.М.** Температурный вклад в межфазную энергию граней кристаллов Sc, α-Ti и α-Co на границе с органическими жидкостями / А.М. Апеков, И.Г. Шебзухова // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2016. – Вып. 8. – С. 19-25. DOI: 10.26456/pcascnn/2016.8.019.

References:

1. Gupta S. Advances in molybdenum enriched MOF derived nano-composites for applications outside energy research, *Discover Materials*, 2025, vol. 5, issue 1, art. № 262, p. 12 DOI: 10.1007/s43939-025-00447-9.
2. Fan Q., Song H., Gao B. et al. Recent progress of molybdenum-based nitrides/carbides catalysts for lithium-sulfur batteries, *Energy Materials*, 2025, vol. 5, issue 9, art. no. 500105, 25 p. DOI: 10.20517/energymater.2025.33.
3. Chen Y.H., Shen C.H., Chang T.E. et al. Molybdenum-functionalized metal–organic framework crystals interconnected by carbon nanotubes as negative electrodes for supercapacitors, *MRS Energy and Sustainability*, 2022, vol. 9, issue 2, pp. 332-341. DOI: 10.1557/s43581-022-00034-y.
4. Li Z., Sami, I., Yang, J. et al. Lithiated metallic molybdenum disulfide nanosheets for high-performance lithium–sulfur batteries, *Nature Energy*, 2023, vol. 8, pp. 84–93. DOI: 10.1038/s41560-022-01175-7.
5. 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.
6. 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, issue 3, pp. 280-307. DOI: 10.1070/RCR4554.
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. 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.
9. 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.
10. 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.
11. 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.
12. 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.
13. 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.
14. 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.
15. Yang S., Li D., Chen L. et al. Coupling metal organic frameworks with molybdenum disulfide nanoflakes for targeted cancer theranostics, *Biomaterials Science*, 2021, vol. 9, issue9, pp. 3306-3318. DOI: 10.1039/d0bm02012e.
16. Karami M., Jazani O.M. The progress of molybdenum disulfide 2D nanosheets as bionanocarriers for drug delivery systems: a groundbreaking approach with multiple therapeutic applications, *Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials*, 2025, vol. 35, issue 9, pp. 7129-7158. DOI: 10.1007/s10904-025-03735-2.
17. Jin H.S., Ri K.S., Choe Y.M., Yang H. Evaluation of surface energy and its anisotropy for bcc transition metals by modified embedded atom method, *Indian Journal of Physics*, 2022, vol. 96, issue 11, pp. 3099-3104.

DOI: 10.1007/s12648-021-02237-4.
18. Li C., Lu S., Divinski S., Vitos L. Theoretical and experimental grain boundary energies in body-centered cubic metals, *Acta Materialia*, 2023, vol. 255, art. № 119074, p. 15. DOI: 10.1016/j.actamat.2023.119074.
19. 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. (In Russian).
20. 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.
21. Apekov A.M., Shebzukhova I.G., Khamukova L.A. Mezhfaznaya energiya kristallov alyuminiya na granitsy s nepolyarnymi organicheskimi zhidkostyami. [Interphase energy of aluminum 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]*, 2024, issue 16, pp. 318-326. DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.318. (In Russian).
22. Apekov A.M., Shebzukhova I.G., Khamukova L.A. Mezhfaznaya energiya kristallov palladiya na granitse s nepolyarnymi organicheskimi zhidkostyami. [Interfacial energy of palladium 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]*, 2025, issue 17, pp. 250-258. DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.250. (In Russian).
23. 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.
24. 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. (In Russian).
25. Apekov A.M., Shebzukhova I.G. Temperaturnyy vklad v mezhfaznuyu energiyu graney kristallov Sc, α-Ti I αCo na granitse s organicheskimi zhidkostyami [Temperature contribution to the interfacial energy of the crystals faces of Sc, α-Ti and α-Co at the boundary with the organic liquids], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2016, issue 8, pp. 19-25. DOI: 10.26456/pcascnn/2016.8.019. (In Russian).