

УДК 538.971

Оригинальная статья

Межфазная энергия кристаллов палладия на границе с неполярными органическими жидкостями

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

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

DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.250

Аннотация: Высока роль металлоорганических соединений палладия и нанокристаллов палладия в химической промышленности, в медицине, для хранения и транспортировки водорода и других областях. Внедрение технологии имплантации чипов или других девайсов в живой организм требует понимания физико-химических процессов и свойств на границе раздела органических веществ с металлами. Внедренные таким образом устройства могут контролировать биологические показатели организма, например, ритм сердца, содержание глюкозы, а также доставлять лекарства или стимулировать нервную систему. Особый интерес представляют имплантируемые в мозг нейроинтерфейсы с помощью которых осуществляется управление различных устройств, например, смартфона или компьютера при помощи мысли. Представляет интерес исследование свойств жидких органических носителей водорода включающих наночастицы палладия в качестве катализаторов и позволяющих безопасно хранить, транспортировать и контролируемо выделять водород. В данной работе в рамках электронно-статистического метода получены значения межфазной энергии на границах граней кристалла палладия с органическими жидкостями с учетом дисперсионного взаимодействия ячеек Вигнера-Зейтца на поверхности раздела, а также поляризации металлических ионов и молекул органической жидкости. Получены зависимости межфазной энергии и поправок к межфазной энергии от ориентации металлического кристалла и от диэлектрической проницаемости жидкости. Установлено, что дисперсионная поправка увеличивает, а поляризационная – снижает межфазную энергию. Наибольшее значение межфазной энергии характерно для грани (111) а наименьшее значение для грани (110).

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

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

Original paper

Interfacial energy of palladium crystals at the boundary with nonpolar organic liquids

А.М. Апеков¹, I.G. Shebzukhova², L.A. Khamukova¹

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/2025.17.250

Abstract: Organometallic compounds of palladium and palladium nanocrystals play a significant role

© А.М. Апеков, И.Г. Шебзухова, Л.А. Хамукова, 2025

in chemical industry, medicine, hydrogen storage and transportation, and other fields. The introduction of technology for implanting chips or other devices into a living organism requires understanding the physico-chemical processes and properties at the interface of organic substances with metals. Devices implemented in this way can monitor the biological parameters of the body, for example, heart rhythm, glucose levels, as well as deliver medications or stimulate the nervous system. Of particular interest are neural interfaces implanted in the brain, which control various devices, for example, a smartphone or computer using thought. It is of interest to study the properties of liquid organic hydrogen carriers that include palladium nanoparticles as catalysts and allow safe storage, transportation and controlled release of hydrogen. In this work, the values of the interfacial energy at the boundaries of the faces of a palladium crystal with organic liquids are obtained using electron statistical method, taking into account the dispersion interaction of Wigner-Seitz cells at the interface, as well as the polarization of metal ions and organic liquid molecules. The dependences of the interfacial energy and the corrections to the interfacial energy on the orientation of the metal crystal and on the dielectric constant of liquid are obtained. It is established that the dispersion correction increases, and the polarization correction decreases, the interfacial energy. The highest value of the interfacial energy is characteristic of the face (111) and the lowest value for the face (110).

Keywords: interfacial energy, palladium, electronic statistical method, dispersion correction, polarization correction, 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 Physics and Mathematics, 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: 10.07.2025; после рецензирования/reviced: 30.08.2025; принята/accepted 08.09.2025.

1. Введение

Палладий легко образует гидридные фазы при комнатной температуре и нормальном давлении. Модель взаимодействия палладия с водородом является общепринятой [1] и хорошо описывает характер взаимодействия металлов с водородом. Понимание данного взаимодействия нашло применение в хранении водорода [1], накоплении тепла [2], металлгидридных аккумуляторах [3], водородных датчиках [4]. Исследование термодинамики образования гидридов в нанокристаллах палладия различного размера и формы показало, что соответствующие энтальпии и энтропии практически не зависят от размера и формы нанокристаллов [5].

Широкое применение получили катализаторы на основе палладия в следствии понимания механизмов управления селективностью палладиевых катализаторов [6-8]. Катализаторы на основе палладия широко используются в химической промышленности, где необходимо получение веществ с C–N и C–C связями [9-12], в реакциях Сузуки, Хека и Стилла [13-16]. Следует отметить использование «высоковалентных» металлоорганических соединений палладия в катализе [17]. Химические реакции, катализируемые палладием, широко применяются для создания

органических молекул, составляющих фармацевтические препараты [18, 19], полимеров [20].

Жидкие органические носители водорода в которых в качестве катализаторов используются наночастицы палладия привлекли внимание в качестве альтернативного решения для хранения и транспортировки не только водорода, но и его изотопа дейтерия. Благодаря химическому связыванию водорода внутри стабильных органических молекул, позволило более безопасно и эффективно транспортировать и контролируемо высвободить водород [21-23].

Ковалентные органические каркасы (COF – covalent organic frameworks) – новый тип кристаллических пористых материалов построенных с органическими фрагментами, связанными сильными ковалентными связями, подобно тем, что обнаружены в кристаллических неорганических цеолитах и металлоорганических каркасах (MOF – metal-organic frameworks). Материалы COF на основе палладия [24] обладают четко определенными и предсказуемыми двух- или трехмерными пористыми структурами, а превосходная активность материала следует из его уникальной структуры, которая обеспечивает эффективный доступ к активным центрам и быструю диффузию объёмных продуктов.

В связи с вышеизложенным, представляет интерес исследовать межфазную энергию на границе металл-органика. В данной работе, в рамках электронно-статистической теории [25-28], ставилась цель: оценить межфазную энергию (МЭ) граней кристаллов палладия на границе с неполярными органическими жидкостями.

2. Основные формулы и результаты вычислений

Ход потенциала и электронной плотности вблизи границы раздела находятся из решения уравнения Томаса-Ферми (ТФ) с учетом макроскопической диэлектрической проницаемости жидкости. За границу раздела принимается гиббсова поверхность раздела, координата которой находится из условия электронейтральности на данной границе. При расчете МЭ учитываются внутренний $f_{\omega 12}^{(0i)}(hkl)$, внешний $f_{\omega 12}^{(0e)}(hkl)$ вклады, дисперсионная $f_{\omega 12}^g(hkl)$, осцилляционная $f_{\omega 12}^{osc}(hkl)$ и поляризационная $f_{\omega 12}^p(hkl)$ поправки:

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

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

Металлический кристалл разбивается на ячейки Вигнера-Зейтца и определяется поправка на дисперсионное взаимодействие этих ячеек в поверхностном слое [27]:

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

где f – множитель зависящий от координационного числа металлического кристалла, A и D – атомный вес и плотность металла, N_A – число Авогадро; z – число свободных электронов на атом, $\gamma = m^*/m$, m^* и m – эффективная масса и масса свободного электрона, R – радиус сферы равновеликой ячейки Вигнера-Зейтца, r – радиус металлического иона, $n(hkl)$ – концентрация частиц на грани металлического кристалла, $x_\Gamma(\varepsilon)$ – координата гиббсовой поверхности раздела и $n(\varepsilon)$ – показатель степени в решении уравнения ТФ функции диэлектрической проницаемости ε органической жидкости.

Осцилляция электронной плотности на поверхности раздела фаз в периодическом поле кристалла вносит поправку к МЭ определяемую выражением [27]:

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

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 $f_{\omega_{12}}^{pe}(hkl)$ [28, 29]:

$$f_{\omega_{12}}^p(hkl) = f_{\omega_{12}}^{pi}(hkl) + f_{\omega_{12}}^{pe}(hkl), \quad (4)$$

$$f_{\omega_{12}}^{(pi)}(hkl) = -\frac{\alpha V_F^2 n^2 (1 - \chi(0, \varepsilon))^2}{s^2 b^2 \lambda^2} \left[\left(1 - \frac{r + x_\Gamma(\varepsilon)}{bs\lambda} \right)^{-2(n+1)} + \left(1 - \frac{r + x_\Gamma(\varepsilon) + \delta(hkl)}{bs\lambda} \right)^{-2(n+1)} \right] n(hkl), \quad (5)$$

$$f_{\omega_{12}}^{(pe)}(hkl) = -\frac{2V_F^2 \chi^2(0, \varepsilon)}{3\pi s b \lambda^9} \left(1 + \frac{r + x_\Gamma(\varepsilon)}{b \lambda s} \right)^{-9} \frac{S^\mu}{N_A} \times \quad (6)$$

$$\times \left[1 + \frac{18 \chi^2(0, \varepsilon) \left(\frac{V_F}{s} \right)^2 \left(1 + \frac{r + x_\Gamma(\varepsilon)}{b \lambda s} \right)^{-10}}{15 \pi b^2 \lambda^{10}} U \right] \frac{\mu (\varepsilon - 1)}{d (\varepsilon + 2)} n(hkl)$$

Здесь $\chi(0, \varepsilon)$ – безразмерный потенциал на физической поверхности раздела и b – параметр безразмерного потенциала (зависят от 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, $\delta(hkl)$ – межплоскостное расстояние, $S^\mu = f N_A^{1/2} (A/D)^{2/3}$; U – учитывает электрострикционный эффект, μ и d – молярная масса и плотность органической жидкости соответственно.

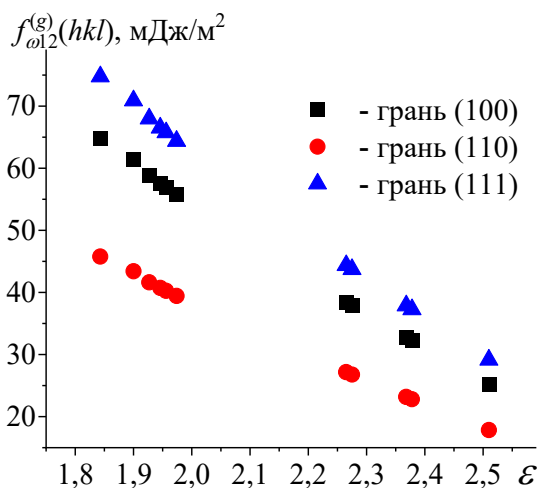


Рис. 1. Дисперсионная поправка к межфазной энергии граней палладия (с ГЦК структурой) на границе с неполярными органическими жидкостями.

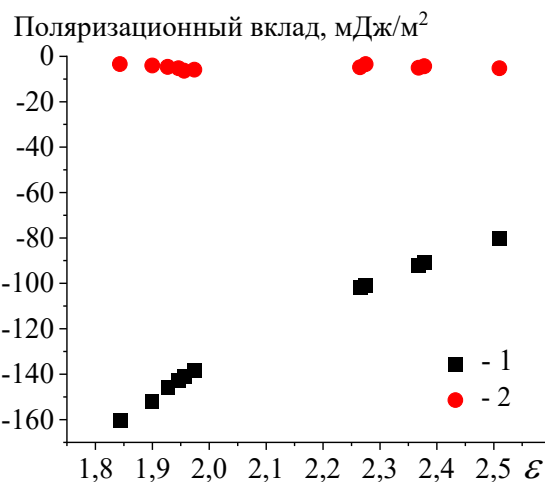


Рис. 2. Зависимость внутреннего (1) и внешнего (2) вкладов в поляризационную поправку к МЭ грани (100) палладия от диэлектрической проницаемости органической жидкости.

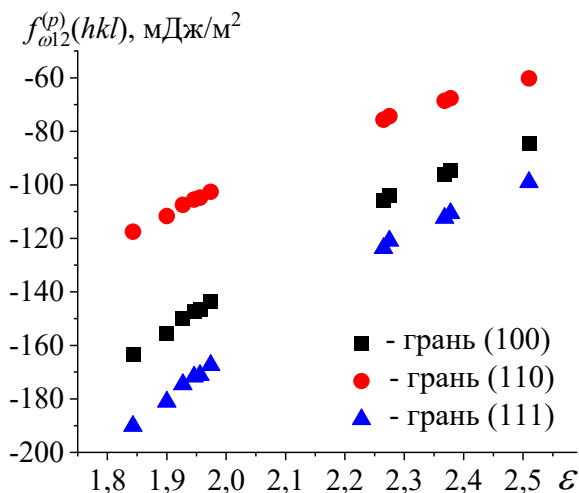


Рис. 3. Зависимость поляризационной поправки к межфазной энергии граней палладия (с ГЦК структурой) от диэлектрической проницаемости органической жидкости.

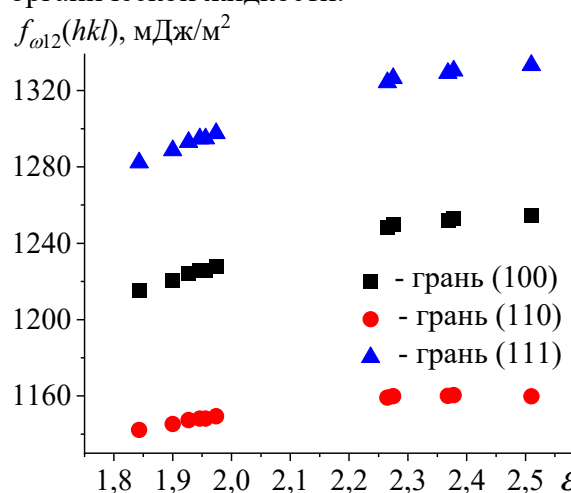


Рис. 4. Зависимость межфазной энергии граней палладия (с ГЦК структурой) от диэлектрической проницаемости органической жидкости.

По полученным выражениям найдены значения МЭ и поправок к МЭ для граней (100), (110) и (111) кристалла палладия на границе с неполярными органическими жидкостями – пентаном, гексаном, гептаном, октаном, деканом, нонаном, *n*-, *m*-, *o*-ксилолом, бензолом, толуолом (см. рис. 1-4). На рисунках представлены зависимости дисперсионной поправки (см. рис. 1), поляризационной поправки (см. рис. 2 и 3) и МЭ с учетом данных поправок (см. рис. 4) от диэлектрической проницаемости жидкости и ориентации кристалла.

3. Заключение

С увеличением диэлектрической проницаемости поправка на дисперсионное взаимодействие снижается, а в целом данная поправка увеличивает МЭ (см. рис. 1). Вклад связанный с поляризацией поверхностных ионов металла отрицательный и линейно уменьшается по величине с увеличением диэлектрической проницаемости жидкости. Вклад связанный с поляризацией органической жидкости незначителен и слабо зависит от диэлектрической проницаемости жидкости (см. рис. 2). Поляризационная поправка снижает МЭ и с увеличением диэлектрической проницаемости она уменьшается по величине (см. рис. 3). С увеличением диэлектрической проницаемости органической жидкости МЭ палладия на границе грань кристалла-органическая жидкость линейно возрастает и зависит от ориентации граней: $f_{\omega 12}(111) > f_{\omega 12}(100) > f_{\omega 12}(110)$.

Библиографический список:

1. **Schlapbach, L.** Hydrogen-storage materials for mobile applications / L. Schlapbach, A. Züttel // *Nature*. – 2001. – V. 414. – I. 6861. – P. 353-358. DOI: 10.1038/35104634.
2. **Felderhoff, M.** High temperature metal hydrides as heat storage materials for solar and related applications / M. Felderhoff, B. Bogdanović // *International Journal of Molecular Science*. – 2009. – V. 10. – I. 1. – P. 325-344. DOI: 10.3390/ijms10010325.
3. **Oumellal, Y.** Metal hydrides for lithium-ion batteries / Y. Oumellal, A. Rougier, G. Nazri, J.M. Tarascon, L. Aymard // *Nature Materials*. – 2008. – V. 7. – I. 11. – P. 916-921. DOI: 10.1038/nmat2288.
4. **Wadell, C.** Plasmonic hydrogen sensing with nanostructured metal hydrides. / C. Wadell, S. Syrenova, C. Langhammer // *ACS Nano*. – 2014. – V. 8. – I. 12. – P. 11925-11940. DOI: 10.1021/nn505804f.
5. **Syrenova, S.** Hydride formation thermodynamics and hysteresis in individual Pd nanocrystals with different size and shape / S. Syrenova, C. Wadell, F. Nugroho et al. // *Nature Materials*. – 2015. – V. 14. – I. 12. – P. 1236-1244. DOI: 10.1038/nmat4409.
6. **Borodziński, A.** Selective hydrogenation of ethyne in ethene-rich streams on palladium catalysts. Part 1. Effect of changes to the catalyst during reaction / A. Borodziński, G.C. Bond // *Catalysis Reviews*. – 2006. – V. 48. – I. 2. – P. 91-144. DOI: 10.1080/01614940500364909.
7. **Borodziński, A.** Selective hydrogenation of ethyne in ethene-rich streams on palladium catalysts. Part 2: Steady-state kinetics and effects of palladium particle size, carbon monoxide, and promoters / A. Borodziński, G.C. Bond // *Catalysis Reviews: Science and Engineering*. – 2008. – V. 50. – I. 3. – P. 379-469. DOI: 10.1080/01614940802142102.
8. **Biffis, A.** Pd Metal catalysts for cross-couplings and related reactions in the 21st century: a critical review / A. Biffis, P. Centomo, A. Del Zotto, M. Zecca // *Chemical Reviews*. – 2018. – V. 118. – I. 4. – P. 2249-2295. DOI: 10.1021/acs.chemrev.7b00443.
9. **Torborg, C.** Recent applications of palladium catalyzed coupling reactions in the pharmaceutical, agrochemical, and fine chemical industries / C. Torborg, M. Beller, // *Advanced Synthesis Catalysis*. – 2009. – V. 351. – I. 18. – P. 3027-3043. DOI: 10.1002/adsc.200900587.
10. **Corbet, J.-P.** Selected patented cross-coupling reaction technologies / J.-P. Corbet, G. Mignani // *Chemical Reviews*. – 2006. – V. 106. – I. 7. – P. 2651-2710. DOI: 10.1021/cr0505268.
11. **Schlummer, B.** Palladium-catalyzed C-N and C-O coupling—a practical guide from an industrial vantage point / B. Schlummer, U. Scholz // *Advanced Synthesis & Catalysis*. – 2004. – V. 346. – I. 13–15. – P. 1599-1626. DOI: 10.1002/adsc.200404216.
12. **Miyaura, N.** Palladium-catalyzed cross-coupling reactions of organoboron compounds / N. Miyaura, A. Suzuki // *Chemical Reviews*. – 1995. – V. 95. – I. 7. – P. 2457-2483. DOI: 10.1021/cr00039a007.
13. **Li, Y.** Suzuki cross-coupling reactions catalyzed by palladium nanoparticles in aqueous solution. / Y. Li, X.M. Hong, D.M. Collard, M.A. El-Sayed // *Organic Letters*. – 2000. – V. 2. – I. 15. – P. 2385-2388. DOI: 10.1021/ol0061687.
14. **Kim, S.-W.** Fabrication of hollow palladium spheres and their successful application to the recyclable heterogeneous catalyst for Suzuki coupling reactions / S.-W. Kim, M. Kim, W.Y. Lee, T. Hyeon // *Journal of the American Chemical Society*. – 2002 – V. 124. – I. 26. – P. 7642-7643. DOI: 10.1021/ja026032z.

15. **Son, S.U.** Designed synthesis of atom-economical Pd/Ni bimetallic nanoparticle-based catalysts for sonogashira coupling reactions / S.U. Son, Y. Jang, J. Park et al. // *Journal of the American Chemical Society*. – 2004. – V. 126. – I. 16. – P. 5026-5027. DOI: 10.1021/ja039757r.
16. **Franzen, R.** The Suzuki, the Heck, and the Stille reaction/three versatile methods for the introduction of new C-C bonds on solid support / R. Franzen // *Canadian Journal of Chemistry*. – 2000. – V. 78. – I. 7. – P. 957-962. DOI: 10.1139/v00-089.
17. **Hickman, A.** High-valent organometallic copper and palladium in catalysis / A. Hickman, M. Sanford // *Nature*. – 2012. – V. 484. – I. 7393. – P. 177-185. DOI: 10.1038/nature11008.
18. **Magano, J.** Large-scale applications of transition metal-catalyzed couplings for the synthesis of pharmaceuticals / J. Magano, J. R. Dunetz // *Chemical Reviews*. – 2011. – V. 111. – I. 3. – P. 2177-2250. DOI: 10.1021/cr100346g.
19. **Evano, G.** Copper-mediated coupling reactions and their applications in natural products and designed biomolecules synthesis / G. Evano, N. Blanchard, M. Toumi // *Chemical Reviews*. – 2008. – V. 108. – I. 8. – P. 3054-3131. DOI: 10.1021/cr8002505.
20. **Corbet, J.-P.** Selected patented cross-coupling reaction technologies / J.-P. Corbet, G. Mignani // *Chemical Reviews*. – 2006. – V. 106. – I. 7. – P. 2651-2710. DOI: 10.1021/cr0505268.
21. **Zhou, M.J.** Recent advances in reversible liquid organic hydrogen carrier systems: from hydrogen carriers to catalysts / M.J. Zhou, Y. Miao, Y. Gu, Y. Xie // *Advanced Materials*. – 2024. – V. 36. – I. 37. – Art. № 2311355. – 26 p. DOI: 10.1002/adma.202311355.
22. **Shao, Z.** Reversible interconversion between methanol-diamine and diamide for hydrogen storage based on manganese catalyzed (de) hydrogenation / Z. Shao, Y. Li, C. Liu et al. // *Nature Communications*. – 2020. – V. 11. – Art. № 591. – 7 p. DOI: 10.1038/s41467-020-14380-3.
23. **Preuster, P.** Liquid organic hydrogen carriers (LOHCs): toward a hydrogen-free hydrogen economy / P. Preuster, C. Papp, P. Wasserscheid // *Accounts of Chemical Research*. – 2017. – V. 50. – I. 1. – P. 74-85. DOI: 10.1021/acs.accounts.6b00474.
24. **Ding, S.-Y.** Construction of covalent organic framework for catalysis: Pd/COF-LZU1 in Suzuki-Miyaura coupling / S.-Y. Ding, J. Gao, Q. Wang et al. // *Journal of the American Chemical Society*. – 2011. – V. 133. – I. 49. – P. 19816–19822. DOI: 10.1021/ja206846r.
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.** 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.
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.** 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.

References:

1. Schlapbach L., Züttel A. Hydrogen-storage materials for mobile applications, *Nature*, 2001, vol. 414, issue 6861, pp. 353-358. DOI: 10.1038/35104634.
2. Felderhoff M., Bogdanović B. High temperature metal hydrides as heat storage materials for solar and related applications, *International Journal of Molecular Science*, 2009. vol. 10, issue 1, pp. 325-344. DOI: 10.3390/ijms10010325.
3. Oumellal Y., Rougier A., Nazri G., Tarascon J.M., Aymard L. Metal hydrides for lithium-ion batteries, *Nature Materials*, 2008. vol. 7, issue 11, pp. 916-921. DOI: 10.1038/nmat2288.
4. Wadell C., Syrenova S., Langhammer C. Plasmonic hydrogen sensing with nanostructured metal hydrides, *ACS Nano*, 2014, vol. 8, issue 12, pp. 11925-11940. DOI: 10.1021/nn505804f.

5. Syrenova S., Wadell C., Nugroho F. et al. Hydride formation thermodynamics and hysteresis in individual Pd nanocrystals with different size and shape, *Nature Materials*, 2015, vol. 14, issue 12, pp. 1236-1244. <https://doi.org/10.1038/nmat4409>.
6. Borodziński A., Bond G.C. Selective hydrogenation of ethyne in ethene-rich streams on palladium catalysts. Part 1. Effect of changes to the catalyst during reaction, *Catalysis Reviews*, 2006, vol. 48, issue 2, pp. 91-144. DOI: 10.1080/01614940500364909.
7. Borodziński A., Bond G.C. Selective hydrogenation of ethyne in ethene-rich streams on palladium catalysts. Part 2: steady-state kinetics and effects of palladium particle size, carbon monoxide, and promoters, *Catalysis Reviews: Science and Engineering*, 2008, vol. 50, issue 3, pp. 379-469. DOI: 10.1080/01614940802142102.
8. Biffis A., Centomo P., Del Zotto A., Zecca M. Pd Metal catalysts for cross-couplings and related reactions in the 21st century: a critical review, *Chemical Reviews*, 2018, vol. 118, issue 4, pp. 2249-2295. DOI: 10.1021/acs.chemrev.7b00443.
9. Torborg C., Beller M. Recent applications of palladium catalyzed coupling reactions in the pharmaceutical, agrochemical, and fine chemical industries, *Advanced Synthesis Catalysis*, 2009, vol. 351, issue 18, pp. 3027-3043. DOI: 10.1002/adsc.200900587.
10. Corbet J.-P., Mignani G. Selected patented cross-coupling reaction technologies, *Chemical Reviews*, 2006, vol. 106, issue 7, pp. 2651-2710. DOI: 10.1021/cr0505268.
11. Schlummer B., Scholz U. Palladium-catalyzed C-N and C-O coupling—a practical guide from an industrial vantage point, *Advanced Synthesis & Catalysis*, 2004, vol. 346, issue 13-15, pp. 1599-1626. DOI: 10.1002/adsc.200404216.
12. Miyaura N., Suzuki A. Palladium-catalyzed cross-coupling reactions of organoboron compounds, *Chemical Reviews*, 1995, vol. 95, issue 7, pp. 2457-2483. DOI: 10.1021/cr00039a007.
13. Li Y., Hong X.M., Collard D.M., El-Sayed M.A. Suzuki cross-coupling reactions catalyzed by palladium nanoparticles in aqueous solution, *Organic Letters*, 2000, vol. 2, issue 15, pp. 2385-2388. DOI: 10.1021/ol0061687.
14. Kim S.-W., Kim M., Lee W.Y., Hyeon T. Fabrication of hollow palladium spheres and their successful application to the recyclable heterogeneous catalyst for Suzuki coupling reactions, *Journal of the American Chemical Society*, 2002, vol. 124, issue 26, pp. 7642-7643. DOI: 10.1021/ja026032z.
15. Son S.U., Jang Y., Park J. et al. Designed synthesis of atom-economical Pd/Ni bimetallic nanoparticle-based catalysts for sonogashira coupling reactions, *Journal of the American Chemical Society*, 2004, vol. 126, issue 16, pp. 5026-5027. DOI: 10.1021/ja039757r.
16. Franzen, R. The Suzuki, the Heck, and the Stille reaction/three versatile methods for the introduction of new C-C bonds on solid support, *Canadian Journal of Chemistry*, 2000, vol. 78, issue 7, pp. 957-962. DOI: 10.1139/v00-089.
17. Hickman A., Sanford M. High-valent organometallic copper and palladium in catalysis, *Nature*, 2012, vol. 484, issue 7393, pp. 177-185. DOI: 10.1038/nature11008.
18. Magano J., Dunetz J. R. Large-scale applications of transition metal-catalyzed couplings for the synthesis of pharmaceuticals, *Chemical Reviews*, 2011, vol. 111, issue 3, pp. 2177-2250. DOI: 10.1021/cr100346g.
19. Evano G., Blanchard N., Toumi M. Copper-mediated coupling reactions and their applications in natural products and designed biomolecules synthesis, *Chemical Reviews*, 2008, vol. 108, issue 8, pp. 3054-3131. DOI: 10.1021/cr8002505.
20. Corbet J.-P., Mignani G. Selected patented cross-coupling reaction technologies, *Chemical Reviews*, 2006, vol. 106, issue 7, pp. 2651-2710. DOI: 10.1021/cr0505268.
21. Zhou M.J., Miao Y., Gu Y., Xie Y. Recent advances in reversible liquid organic hydrogen carrier systems: from hydrogen carriers to catalysts, *Advanced Materials*, 2024, vol. 36, issue 37, art. no. 2311355, 26 p. DOI: 10.1002/adma.202311355.
22. Shao Z., Li Y., Liu C. et al. Reversible interconversion between methanol-diamine and diamide for hydrogen storage based on manganese catalyzed (de) hydrogenation, *Nature Communications*, 2020, vol. 11, art. no. 591, 7 p. DOI: 10.1038/s41467-020-14380-3.
23. Preuster P., Papp C., Wasserscheid P. Liquid organic hydrogen carriers (LOHCs): toward a hydrogen-free hydrogen economy, *Accounts of Chemical Research*, 2017, vol. 50, issue 1, pp. 74-85. DOI: 10.1021/acs.accounts.6b00474.
24. Ding S.-Y., Gao J., Wang Q. et al. Construction of covalent organic framework for catalysis: Pd/COF-LZU1 in Suzuki-Miyaura coupling, *Journal of the American Chemical Society*, 2011, vol. 133, issue 49, pp. 19816-19822. DOI: 10.1021/ja206846p.
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. (In Russian).

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. Vklad dispersionnogo vzaimodejstviya v mezhfaznyuyu 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).

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., 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).