



Исследование состава поверхности материалов для прогнозирования свойств

Ольга Васильевна Астраух¹, Татьяна Васильевна Кармановская²

¹Калининградский государственный технический университет, Калининград, Россия

²Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет), Санкт-Петербург, Россия

¹sec_chemistry@bgarf.ru

²KTV@olpet.ru

Аннотация. Педагогические подходы к изучению физико-химических процессов на поверхности твердого вещества с использованием различных методов исследования должны быть ориентированы на развитие у студентов практических навыков, теоретического понимания и критического мышления. Представлено исследование поверхности образца на содержание различных активных центров, а также проведен сравнительный анализ различных видов обработки поверхности. Это позволило выявить закономерности изменений структуры и проанализировать их физико-химические свойства, что важно для изучения характера взаимодействия с окружающей средой. На основе полученных данных предложены технические решения, направленные на оптимизацию состава поверхности и прогнозирование свойств материалов. Такие подходы позволяют повысить эффективность использования материалов в различных отраслях промышленности, обеспечить их адаптацию под конкретные эксплуатационные требования и условия в процессе обучения.

Ключевые слова: педагогический опыт, поверхность твердого вещества, активные центры, обработка веществ, структура поверхности, физико-химические свойства, состав поверхности, ИК-спектроскопические исследования, прогнозирование свойств.

Для цитирования: Астраух, О. В., Кармановская, Т. В. Исследование состава поверхности материалов для прогнозирования свойств // Известия Балтийской государственной академии рыбопромышленного флота. – 2025. – № 4(74). – С. 140–144.

Современные методы обучения систематизируют представления о природе поверхности твердого вещества основываются на концепциях, учитывающих атомарную структуру, электронные свойства и взаимодействия на границе раздела с окружающей средой. Основные идеи включают следующие положения:

1. Атомарная структура поверхности: поверхность твердого тела – это не просто плоская граница, а область, где атомарная структура отличается от внутренней части вещества. На поверхности атомы имеют меньшую координацию и более активные свободные связи.

2. Электронные свойства: на поверхности возникают особые электронные состояния, такие как поверхностные электроны и поверхностные уровни, которые влияют на химические реакции, адсорбцию и каталитическую активность.

3. Поверхностная энергия и конфигурация: поверхность характеризуется поверхностной энергией, которая зависит от ориентации кристаллических граней и дефектов. Системы стремятся минимизировать поверхностную энергию, что приводит к определенной морфологии и структуре поверхности.

4. Влияние дефектов и адсорбированных веществ: наличие дефектов, примесей и адсорбированных молекул существенно изменяет свойства поверхности, делая ее более реактивной или изменяя ее физические характеристики.

5. Поверхностные явления: процессы такие как адсорбция, десорбция, диффузия, окисление и восстановление происходят на поверхности и играют ключевую роль в различных технологических и природных процессах.

6. Современные методы исследования: для изучения поверхности используют такие методы, как сканирующая электронная микроскопия (SEM), атомно-силовая микроскопия (AFM), рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (XPS) и другие, что позволяет получать детальные сведения о структуре и свойствах поверхностей.

Эти концепции позволяют лучше понять механизмы взаимодействия твердых веществ с окружающей средой и разрабатывать новые материалы с заданными поверхностными свойствами. Все это убедительно доказывает, что обучение должно объединять в себе различные педагогические приемы, направленные на изучение психолого-педагогических процессов, всестороннее гармоничное развитие будущего специалиста и подготовке к решению сложных профессиональных задач [1].

Исследовательская деятельность студентов предполагает активное внедрение инновационных подходов к процессам на поверхности твердых веществ, что еще раз подчеркивает актуальность проведенного исследования.

Методологической основой в процессе изучения комплекса работ для студентов является исследовательский подход, который определяет дальнейший экспериментальный процесс. Исследовательская деятельность студентов направлена на многогранное изучение поверхности твердых веществ с применением различных методик.

Студенты учатся проводить исследования и оценку поверхности различных материалов, такой подход способствует развитию поисковых навыков, умению формулировать гипотезы, планировать эксперименты и интерпретировать результаты. Задача практических занятий заключается в проведении лабораторных экспериментов по подготовке и анализу образцов, обработанных в различных условиях, обучение работе с современным оборудованием и интерпретации экспериментальных данных, в результате постановки конкретных задач, требующих применения различных современных методов анализа поверхности для их решения.

В результате развиваются навыки критического мышления и умения принимать обоснованные решения. Интеграция знаний из физики, химии, материаловедения и инженерных дисциплин важна для комплексного понимания процессов, а регулярное проведение тестов, дискуссий и рефлексий важны для оценки усвоения материала и корректировки учебного процесса. Они стимулирует самостоятельную практическую работу и обучение на ошибках.

Для изучения физико-химических процессов на поверхности твердого вещества под воздействием ускоренных электронов необходимо использование метода исследования, который позволяет качественно и количественно определять изменения функционально-химического состава поверхности с целью практического использования полученных результатов.

Особенностями рассматриваемых процессов являются безреагентный характер обработки и варьирование параметров, что приводит к необходимости дифференцирования близких по энергетике поверхностных центров и функциональных групп одинакового химического состава [6].

При использовании метода адсорбции кислотно-основных индикаторов с различными значениями величины показателя кислотности pK_a от 1 до 4, характеризующих точку перехода между кислотной и основной формами индикатора ($HInd \rightleftharpoons Ind^- + H^+$), происходит изменение окраски индикатора. В процессе взаимодействия с поверхностью происходит частичная адсорбция индикатора на активных центрах с соответствующим значением pK_a , что приводит к изменению интенсивности окраски, которую можно зафиксировать спектрофотометрически [2].

Это позволяет количественно охарактеризовать содержание активных центров адсорбции данного типа.

Индикаторы с наиболее низкими (как правило отрицательными) значениями pK_a селективно адсорбируются на активных центрах основного льюисовского типа (содержащих неподеленную электронную пару и способных к захвату протона с диссоциацией молекулы воды) [3]. Далее по мере увеличения величины pK_a индикаторов их селективная адсорбция происходит на бренстедовских кислотных ($pK_a \sim 0 \dots 7$, поверхностные ОН группы с тенденцией к отщеплению протона), бренстедовских основных ($pK_a \sim 7 \dots 14$, поверхностные ОН группы с тенденцией к отщеплению всего гидроксила) и льюисовских кислотных ($pK_a > 14$, положительно заряженные ионы или атомы со свободной орбиталью, способные к захвату гидроксила с диссоциативной адсорбцией воды) центрах [4]. Общая схема распределения кислотно-основных центров на поверхности приведена на рисунке, на примере твердого оксида состава АО.



Рис. Кисотно-основная схема частично дегидратированной поверхности твердого оксида

Изменение оптической плотности раствора кислотно-основного индикатора при контакте с каким-либо веществом может происходить как за счет адсорбции индикатора на его поверхности, так и вследствие изменения кислотности водной среды при взаимодействии воды с lyonсовскими и бренстедовскими кислотными и основными центрами на поверхности [5].

Поскольку адсорбция изменяет концентрацию свободных индикаторов в растворе и на поверхности, она приводит к изменению интенсивности окраски, что можно зафиксировать спектрофотометрически. Такой метод позволяет:

- определить активность и характер поверхности (например, наличие кислотных или основных центров);
- оценить сродство поверхности к определенным формам индикатора;
- получить информацию о поверхностных свойствах, связанных с адсорбцией и кислотно-основными характеристиками.

Использование индикаторов с различными рКа позволяет более точно определить точку равновесия между поверхностью и раствором, а спектрофотометрическая фиксация изменения окраски обеспечивает количественный анализ процессов адсорбции и взаимодействия. Такой подход широко применяется в исследованиях для оценки кислотных и основных свойств поверхности твердых веществ, а также для мониторинга изменений, вызванных различными обработками или состоянием поверхности.

В ходе эксперимента так же проводится спектрофотометрическое измерение оптической плотности исходного водного раствора индикатора заданной концентрации (D_0), аналогичного раствора, содержащего навеску заданной массы исследуемого вещества, взаимодействующего с растворителем и адсорбирующего индикатор (D_1), и раствора индикатора, добавленного к растворителю, декантированному после контакта с навеской вещества, что исключает процесс непосредственной сорбции индикатора (D_2). Полученные данные позволяют определить содержание на поверхности исследуемого образца активных центров с соответствующим используемому индикатору значением рКа как

$$q(\text{pKa}) = \left| \frac{D_0 - D_1}{m_1} \right| \pm \left| \frac{D_0 - D_2}{m_2} \right| \cdot C_{\text{ind}} V_{\text{ind}} / D_0$$

где C_{ind} – концентрация индикатора в растворе, V_{ind} – объем раствора индикатора, взятый для анализа, m_1 и m_2 – близкие по величине (~ 20 мг) массы навесок при определении величин D_1 и D_2 соответственно; знак "+" соответствует разнонаправленному изменению D_1 и D_2 относительно D_0 , знак "-" – однонаправленному.

Такой метод дает количественную оценку поверхностных кислотных и основных свойств, а также степень адсорбции индикатора, что важно для характеристики поверхности твердых веществ и их взаимодействия с окружающей средой.

Использование большого количества индикаторов (14-18 и более) с различными значениями рКа позволяет дифференцировать близкие по природе и энергетике типы поверхностных функциональных групп с количественным определением их содержания, что труднодостижимо при использовании других методов исследования (в частности, ИК-спектроскопии и термодесорбции) [6].

В некоторых случаях для дифференцирования гидратированных (бренstedовских) и апротонных (льюисовских) поверхностных групп (как правило, при наличии центров в пограничных областях со значениями $pK_a \sim 0$ или $\sim 12-14$) проводится дополнительное исследование методом анализа кинетики изменения рН суспензии после погружения в воду навески исследуемого образца. Резкое изменение рН в кислую или основную сторону в течение первых 10-30 секунд после погружения навески свидетельствует о наличии быстро гидратирующихся апротонных льюисовских центров, а медленное плавное изменение рН - о присутствии уже гидроксированных бренstedовских [7]. Этот подход позволяет точно определить природу поверхностных центров, что важно для понимания их химической активности, адсорбционных свойств и поведения в различных технологических процессах.

Такой анализ особенно актуален при исследовании сложных поверхностей, где могут сосуществовать центры разного типа и реакции с водой протекают с разной скоростью.

Названия и характеристики кислотно-основных индикаторов, применяемых в проводимых исследованиях, приведены в таблице.

Таблица

Характеристики кислотно-основных индикаторов

№	Индикатор	pK_a	$\lambda_{\text{макс.}}, \text{нм}$
1	Этиленгликоль	14,2	200
2	Индигокармин	12,8	610
3	Нильский голубой	10,5	640
4	Тимоловый синий	8,8	430
5	Бромтимоловый синий	7,3	430
6	Бромкрезоловый пурпурный	6,4	590
7	Метиловый красный	5,0	430
8	Бромфеноловый синий	4,1	590
9	Метиловый оранжевый	3,5	460
10	М-нитроанилин	2,5	340
11	Фуксин (основание)	2,1	540
12	Бриллиантовый зеленый	1,3	610
13	Кристаллический фиолетовый	0,8	580
14	о-Нитроанилин	-0,3	410
15	п-Хлор-нитроанилин	-0,9	330
16	Динитроанилин	-4,4	340

Таким образом, рассматриваемый метод обладает высокой значимостью для исследования поверхности твердых веществ и широко применяется в различных областях материаловедения и химии. К числу его ключевых направлений относятся:

Определение адсорбционной активности и характера взаимодействия с окружающей средой (вода, растворы, газообразные вещества) различных веществ. Это позволяет оценить, насколько поверхность материала активна и как она взаимодействует с различными агентами, что важно для катализаторов, фильтров, сенсоров и других технологий;

Анализ образцов одного и того же материала, подвергавшегося различным видам обработки (например, термообработка при различных температурах и длительности, воздействие ускоренных электронов с варьируемой дозой и энергией), помогает выявить изменения в структуре и свойствах поверхности, определить оптимальные режимы обработки для достижения нужных характеристик, повысить эффективность производства и качество материалов;

Сравнительный анализ близких по строению и составу материалов выявил ряд факторов, связывающих свойства поверхности (например, содержание активных центров с определенным pK_a) с макроскопическими физико-химическими и технологическими характеристиками. Это способствует оптимизации состава материалов, прогнозированию их поведения и определению перспективных вариантов для использования в различных промышленных отраслях. Практическое применение данной методики особенно актуально при исследовании поверхности полимерных материалов, где важно учитывать их активность, адсорбционные свойства и изменения при различных обработках. Полученные выводы позволяют эффективно использовать этот подход



для разработки новых материалов, улучшения их свойств и повышения надежности технологических процессов.

Разнообразные педагогические подходы к изучению физико-химических процессов на поверхности твердого вещества под воздействием ускоренных электронов с использованием различных методов исследования ориентированы на развитие у студентов практических навыков, теоретического понимания и критического мышления. Применяемые педагогические подходы позволяют студентам развить навыки практической деятельности, необходимые для дальнейшей профессиональной деятельности в области материаловедения, нанотехнологий и физико-химического анализа.

Список источников

1. Современные образовательные технологии : учебник для вузов / под ред. Е. Н. Ашаниной, О. В. Васиной, С. П. Ежова. – 2-е изд., перераб. и доп. – Москва : Юрайт, 2025. – 165 с. – (Высшее образование). – ISBN 978-5-534-06194-9 // Образовательная платформа Юрайт. – URL: <https://urait.ru/bcode/563616> (дата обращения: 25.04.2025).
2. Доломатов, М. Ю. Физико-химия наночастиц : учебник для вузов / М. Ю. Доломатов, Р. З. Бахтизин, М. М. Доломатова. – 2-е изд., перераб. и доп. – Москва : Юрайт, 2025. – 285 с. – (Высшее образование). – ISBN 978-5-534-13077-5 // Образовательная платформа Юрайт. – URL: <https://urait.ru/bcode/566718> (дата обращения: 23.04.2025).
3. Зайцев, О. С. Химия : учебник для вузов / О. С. Зайцев. – Москва : Юрайт, 2025. – 470 с. – (Высшее образование). – ISBN 978-5-9916-8073-8 // Образовательная платформа Юрайт. – URL: <https://urait.ru/bcode/560467> (дата обращения: 23.04.2025).
4. Кудряшева, Н. С. Физическая и коллоидная химия: учебник и практикум для среднего профессионального образования / Н. С. Кудряшева, Л. Г. Бондарева. – 3-е изд., перераб. и доп. – Москва : Юрайт, 2025. – 452 с. – (Профессиональное образование). – ISBN 978-5-534-17470-0 // Образовательная платформа Юрайт. – URL: <https://urait.ru/bcode/560705> (дата обращения: 23.04.2025).
5. Мишин, А. В. Различные методы осреднения гетерогенных сред: учебник для вузов / А. В. Мишин. – Москва : Юрайт, 2025. – 168 с. – (Высшее образование). – ISBN 978-5-534-18824-0 // Образовательная платформа Юрайт. – URL: <https://urait.ru/bcode/568934> (дата обращения: 23.04.2025).
6. Танабе, К. Твердые кислоты и основания. – Москва : Мир, 1973. – 183 с.
7. Физические методы нанесения нанопокровов : учебник для вузов / под ред. В. С. Мухина, С. Р. Шехтмана. – 3-е изд., перераб. и доп. – Москва : Издательство Юрайт, 2025. – 333 с. – (Высшее образование). – ISBN 978-5-534-13807-8 // Образовательная платформа Юрайт. – URL: <https://urait.ru/bcode/565328> (дата обращения: 23.04.2025).

Информация об авторах

О. В. Астраух – кандидат технических наук, доцент;

Т. В. Кармановская – кандидат химических наук, старший преподаватель.

Статья поступила в редакцию 08.10.2025; одобрена после рецензирования 10.11.2025; принята к публикации 17.11.2025.