

物理化学理论授课-实践验证-模拟分析联合教学模式探索 ——以表面张力为例

林猛, 张恒, 苑世领*

山东大学化学与化工学院, 济南 250100

摘要: 通过对物理化学理论与实验课程的思考, 将教学实验引入理论教学中, 在强化巩固学生基础知识及实验技能的同时, 启发学生进行研究性、探索性学习, 使学生能更积极主动地参与到自主实验设计过程中, 并利用理论模拟手段揭示实验过程中分子层面变化。通过独立的文献调研、实验设计与实施、实验现象分析与理论验证等, 促进学生更好地理解化学理论和实验原理, 提升课堂教学质量。

关键词: 101计划; 物理化学课程融合; 实验教学; 表面张力

中图分类号: G64; O64

Exploring a Combined Theory-Practice-Simulation Teaching Model in Physical Chemistry: A Case Study of Surface Tension

Meng Lin, Heng Zhang, Shiling Yuan *

School of Chemistry and Chemical Engineering, Shandong University, Jinan 250100, China.

Abstract: This study explores the integration of theoretical and experimental teaching in physical chemistry courses by incorporating laboratory experiments into the theoretical curriculum. This approach not only reinforces students' foundational knowledge and experimental skills but also encourages research-based and inquiry-driven learning. It enables students to take a more active role in independent experimental design and employ theoretical simulations to investigate molecular-level changes during experiments. Through independent literature review, experimental design and execution, analysis of experimental phenomena, and theoretical validation, this model enhances students' understanding of chemical theory and experimental principles, ultimately improving the overall quality of classroom instruction.

Key Words: The "101 plan"; Integration of physical chemistry courses; Laboratory teaching; Surface tension

1 引言

基础学科系列“101计划”是拔尖创新人才培养的一项筑基性工程,“101计划”的实施将带动基础学科人才培养理念的变革,催生高质量人才培养体系的构建,在全面提升人才培养质量的同时,促进高水平师资队伍建设和进一步提高教学质量。化学作为传统的基础学科,其学科体系已相对成熟,课程及教材相对系统、完整,人才培养基础雄厚。但理论课和实验课教材更新相对滞后,与学科前沿衔接不够,以学生为中心的学科创新性、建设性不足,难以引导、激励学生更深层次发展^[1]。

收稿: 2024-07-11; 录用: 2024-09-13; 网络发表: 2024-11-11

*通讯作者, Email: shilingyuan@sdu.edu.cn

基金资助: 山东大学实验室建设与管理研究项目(sy20232204, sy20242201); 山东省本科高校教学改革研究项目(Z2023084)

物理化学作为化学的二级学科,是基于实际生产,研究物质变化过程中物理、化学现象,探求化学变化基本规律的学科。物理化学课程基本概念多,相关化学理论抽象,教学中若只注重传授书本知识,过于强调理论和概念,容易使学生感到相关知识晦涩难懂^[2]。作为物理化学教学重要组成部分的物理化学实验,是训练学生掌握用物理化学的理论和方法研究化学变化及其规律的课程,是培养学生物理化学基本素养、动手能力和科研能力的重要教学环节^[3,4]。

受限于物理化学理论课程和实验课程讲授内容的不同步,现阶段物理化学实验教学中多数学生往往对实验原理和内容一知半解,实验过程中只会机械地按照教材上的步骤进行,导致学生无法与理论课程中相关内容联系起来,更不能主动去理解和思考实验的意义^[5,6]。虽然物理化学实验内容的设置,是对理论教学中的一些基础知识的验证,在一定程度上能加深学生对某一公式或概念的理解,但缺少物理化学这门学科从实践中来到实践中去的特色,未能充分发挥学生的主体作用。以山东大学化学与化工学院为例,学生在大二年级下学期开始物理化学理论课的学习,以讲授基本概念为主,而物理化学实验设置在大三三年级,主要采用“教师传授-学生接受”的模式,且理论课教师和实验课教师通常不相同。因此,如何将物理化学理论与实验课程有机结合,发挥物理化学教学在拔尖人才培养中的关键作用,对培养高水平的研究型人才具有重要的意义。

2 理论教学中融入实验思维

作者长期承担本科生物理化学理论课和物理化学实验课程的教学工作,了解理论课与实验课之间的联系,更能体会教学过程中内容不同步带来的诸多问题。为更好地实现理论知识与实验验证相结合,作者在理论教学讲授基础内容的同时,将相关实验内容融入到课堂中,通过简单的实验教学视频或虚拟仿真实验,让学生掌握实验原理,了解实验方法及数据处理手段,加深对所学基础理论知识的认识。此外,鼓励学生积极主动地对实验内容进行创新或改进,提高学生的自主实验能力,将实验教学活动转变为学生自己设计实验方案。

2.1 教学实例

下面以“表面张力”实验为例,讲述该方法的实施过程。

理论教学内容:在讲授“溶液表面吸附现象”一节时,提到当溶质为可溶性有机化合物(如醇、醛、酸、胺等)时溶液发生正吸附现象,吉布斯推导出吸附量与溶液的表面张力随浓度的变化率之间的关系:

$$\Gamma = -\frac{c}{RT} \left(\frac{d\sigma}{dc} \right)_T \quad (1)$$

其中 Γ 为表面吸附量, c 为平衡时溶质浓度, σ 为表面张力,当 $d\sigma/dc < 0$ 时,为正吸附^[7]。

实验教学视频:利用最大泡压法测定溶液表面张力。通过公式(1),并结合根据拉普拉斯公式^[8]:

$$\Delta p = \frac{2\sigma}{R} \quad (2)$$

计算得出不同摩尔浓度下的 Γ (公式(2)中 Δp 为附加压力, R 为气泡曲率半径),并根据朗格缪尔吸附等温式:

$$\Gamma = \Gamma_{\infty} \frac{Kc}{1 + Kc} \quad (3)$$

以 c/Γ 对 c 作图,计算饱和和吸附量 Γ_{∞} ,吸附分子的截面积 S_0 和吸附层厚度 δ ^[8]。

结合理论教学的实验创新思考:溶液表面张力的测定方法有白板法、毛细管上升法、旋转滴法和最大泡压法等^[9,10]。最大泡压法因装置简单、测量速度快,是大学物理化学实验中测定溶液表面张力的经典方法,通过该实验可以巩固、加深学生对溶液表面吸附理论知识的理解^[11,12]。大学物理化学基础实验中,液体表面张力测定所用试剂多为醇类溶液。以山东大学为例,实验以正丁醇溶液为研究对象,但正丁醇具有挥发性且有较强的刺激性,实验过程中学生体验感不好。依据物理化学

实验教材讨论内容,用表面张力方法可研究不同链长的醇类同系物及不同链长的羧酸类同系物的界面吸附现象,为此部分高校用乙醇代替正丁醇进行相关实验^[8]。除醇类及羧酸类有机化合物外,为探究并扩展可利用最大泡压法测定溶液表面张力的有机化合物种类,通过查阅常见有机化合物表面张力得知,乙酰乙酸乙酯与正丁醇数据相似,且乙酰乙酸乙酯可用于香料和食品添加剂等方面,毒性相对较小^[13]。鉴于此,设计以具有果香味的酯类化合物(乙酰乙酸乙酯)代替正丁醇,利用最大泡压法对乙酰乙酸乙酯溶液进行表面张力测定的实验。

同时,为了从分子水平上揭示乙酰乙酸乙酯和正丁醇在溶液界面的排布情况,结合大三学年开设的“分子模拟实验”^[14,15],设计采用分子动力学模拟方法构建两种试剂水溶液的气液界面模型。对不同体系达到平衡后溶剂分子在水溶液中分布情况进行分析,在分子水平上理解溶质“正吸附”现象及分子间的相互作用。

2.2 实验探索

2.2.1 具体实验设计

实验试剂及仪器:乙酰乙酸乙酯(AR),蒸馏水;表面张力实验测定装置,恒温槽,洗耳球,移液管,烧杯,容量瓶等。

仪器准备与检漏:表面张力管及毛细管先后用去离子水和无水乙醇洗净,在烘箱中烘干备用。恒温条件下,在开放体系中将数字压差计置零后,加入蒸馏水,并调节表面张力管下端的活塞使管内蒸馏水液面与毛细管尖端相切。打开蠕动泵,待压差计显示一定数字后,关闭蠕动泵,对体系进行检漏。若压差保持不变说明体系密闭性良好,可以进行实验。

仪器常数测量:调节恒温槽温度为35 °C,注入蒸馏水,调节液面与毛细管下端相切。连接抽气管,打开蠕动泵调节抽气速度,使气泡在毛细管尖端单泡逸出,并保持单个气泡从形成到逸出时间约为10秒。当气泡在毛细管尖端逸出瞬间,压差计数值不再发生变化,该压力值即为最大压差,连续记录最大压差值三次,取平均值。

表面张力随浓度变化测定:分别配制乙酰乙酸乙酯不同浓度的溶液。在上述体系中,按照浓度由低到高顺序,测定不同浓度的乙酰乙酸乙酯溶液的最大压差,连续读取三次数据,取平均值。

2.2.2 理论模拟方法

采用分子动力学模拟方法(GROMACS软件)构建两种不同浓度的乙酰乙酸乙酯和正丁醇水溶液气液界面模型,即在 $6 \times 6 \times 6 \text{ nm}^3$ 的模拟格子中随机填入100或350个乙酰乙酸乙酯或正丁醇分子分别代表低浓度和高浓度溶液体系,然后填充水分子至充满格子,最后将模拟格子在 z 方向扩大三倍形成气液界面初始模型。进行分子动力学模拟,观察体系达到平衡后界面最终结构。

3 数据分析与讨论

3.1 乙酰乙酸乙酯表面张力

按照上述实验步骤,对35 °C下乙酰乙酸乙酯溶液进行表面张力的测定及数据处理(表1),其中依据Harkins经验公式^[16],35 °C时水的表面张力为 $\sigma = 0.0704 \text{ N}\cdot\text{m}^{-1}$ 。

图1为乙酰乙酸乙酯水溶液表面张力随浓度的变化情况。乙酰乙酸乙酯属于短链酯类羧酸衍生物,随溶液浓度升高,乙酰乙酸乙酯水溶液的表面张力随物质浓度增加而逐渐降低。当浓度较低时,下降较快;浓度升高后,下降较慢^[7]。

图2为 c/Γ 与浓度 c 的关系曲线。由斜率可得35 °C时, $\Gamma_{\infty} = 5.52 \times 10^{-6} \text{ mol}\cdot\text{m}^{-2}$ 。由 $S_0 = 1/(\Gamma_{\infty}L)$ (L 为阿佛加德罗常数)可求出吸附分子的截面积为 $S_0 = 3.01 \times 10^{-19} \text{ m}^2$ 。已知溶质(乙酰乙酸乙酯)的密度 ρ 及分子量 M ,可计算出吸附层厚度 $\delta = \Gamma_{\infty}M/\rho = 0.71 \text{ nm}$ 。

3.2 模拟分析

图3表示不同浓度下,乙酰乙酸乙酯和正丁醇水溶液气液界面模型进行50 ns的分子动力学模拟,待体系达到平衡后最终模拟结果。同正丁醇性质类似,乙酰乙酸乙酯溶于水后,分子受到指向溶液

表1 35 °C时最大泡压法测定乙酰乙酸乙酯溶液表面张力的数据

序号	c (mol·L ⁻¹)	Δp (kPa)	σ (N·m ⁻¹)	$10^6 \times \Gamma$ (mol·m ⁻²)	$10^{-5} \times c/\Gamma$ (m ² ·L ⁻¹)
1	0.0	0.607	0.0704	—	—
2	0.1	0.516 ± 0.01	0.0598 ± 0.001	2.77	0.36
3	0.2	0.471 ± 0.008	0.0547 ± 0.0009	3.69	0.54
4	0.3	0.425 ± 0.008	0.0493 ± 0.001	4.15	0.72
5	0.4	0.413 ± 0.003	0.0479 ± 0.0004	4.42	0.90
6	0.5	0.377 ± 0.005	0.0437 ± 0.0006	4.60	1.09
7	0.8	0.334 ± 0.002	0.0387 ± 0.0002	4.91	1.63

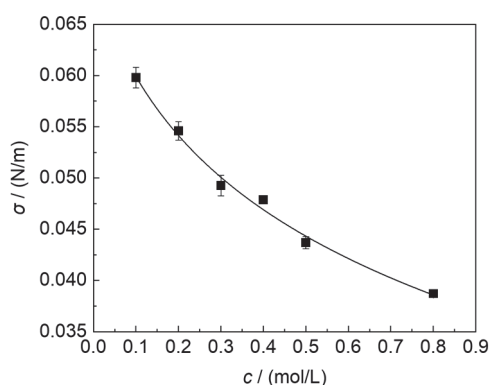
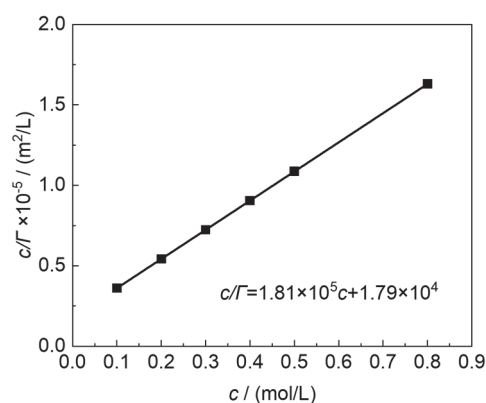
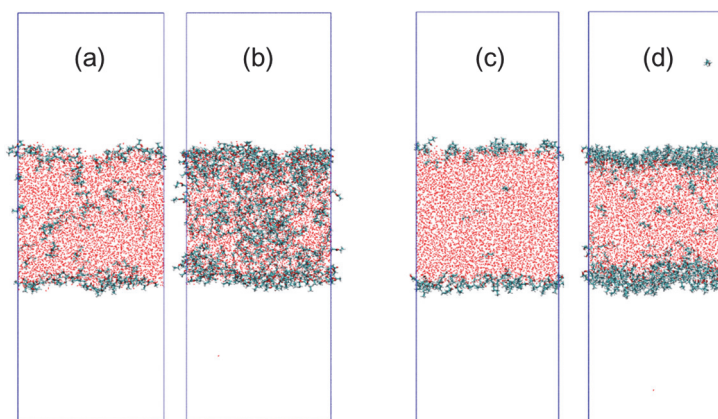

 图1 乙酰乙酸乙酯溶液表面张力 σ 随浓度 c 的变化曲线

 图2 乙酰乙酸乙酯溶液 c/Γ 与浓度 c 的关系曲线


图3 乙酰乙酸乙酯(a、b)和正丁醇(c、d)的气液界面模拟最终结果

内部的引力小于水，使溶液的表面张力下降，乙酰乙酸乙酯分子在表面层聚集，从而引起溶液表面层中溶质的浓度大于其在溶液本体浓度，产生“正吸附”现象。对于有“正吸附”现象的溶液，溶剂分子在液体表面的排列方式随浓度改变而改变，即浓度增大时，表面张力下降(计算得到的纯水溶液表面张力为 $0.0455 \text{ N}\cdot\text{m}^{-1}$ ，低浓度乙酰乙酸乙酯溶液表面张力为 $0.0422 \text{ N}\cdot\text{m}^{-1}$ ，高浓度乙酰乙酸乙酯溶液表面张力为 $0.0381 \text{ N}\cdot\text{m}^{-1}$)。结合定量数据(图4)可以看出乙酰乙酸乙酯和正丁醇在低浓度条件下达到平衡后，大部分均聚集在气液界面；高浓度条件下，随着气液界面被铺满，部分分子停留在体相溶液中，该模拟结果与实验结果相吻合。

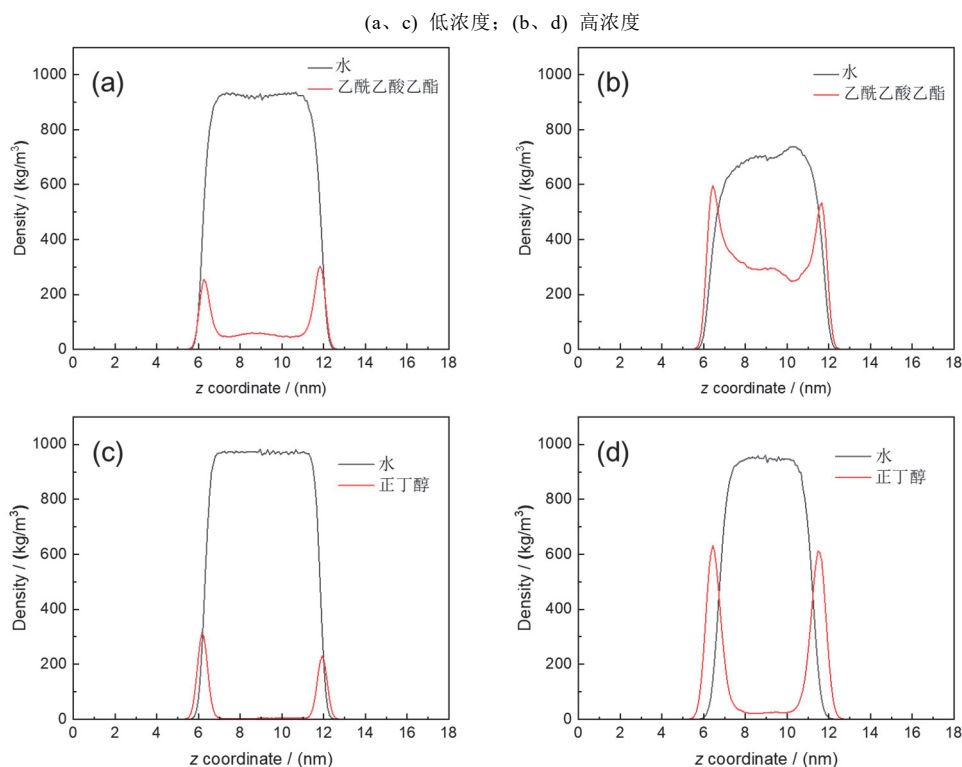


图4 乙酰乙酸乙酯(a、b)和正丁醇(c、d)沿垂直界面方向上的密度分布

(a、c) 低浓度; (b、d) 高浓度

通过对比还可以发现体相中乙酰乙酸乙酯残留较多, 且乙酰乙酸乙酯在界面上基本呈平铺状, 丁醇呈竖直状态(图5)。分析乙酰乙酸乙酯结构发现, 其分子中含有较多且分散的亲水基团, 而丁醇的亲水基团集中在一端有关, 计算溶质分子与水分子的结合能亦可发现乙酰乙酸乙酯与水的结合能($-170.0 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$)大于正丁醇与水的结合能($-102.5 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$)。

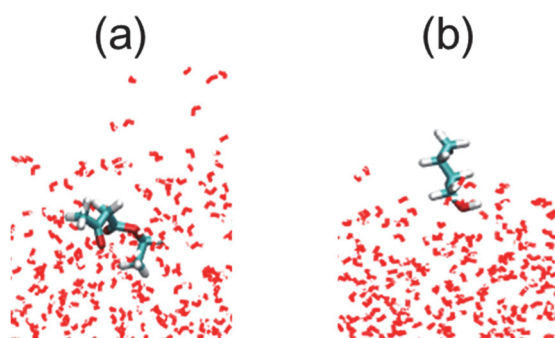


图5 乙酰乙酸乙酯(a)和正丁醇(b)水溶液达平衡后气液界面模拟分子取向

3.3 理论授课-实践验证-模拟分析教学模式对课堂教学的影响

虽然分子模拟结果表明, 在利用最大泡压法测定溶液表面张力的实验中, 乙酰乙酸乙酯不是最理想的正丁醇的替代溶质, 但这恰好为学生提供了通过实验现象分析问题、验证理论并灵活运用理论知识解决问题的机会。同时, 教学实践证明, 课上的实验视频演示, 有助于学生更好地理解所学

知识；课后的资料调研、具体实验操作方案设计及理论模型的构建，可以更好地培养他们的科学思维能力和动手实践能力。与传统的理论授课模式相比，“理论授课-实践验证-模拟分析”的教学模式可以活跃课堂气氛，调动学生积极性，让学生更快地融入课堂学习使学生在实践中体验到创新的快乐和自信。

4 结语

通过以乙酰乙酸乙酯代替正丁醇，利用最大泡压法进行溶液表面张力的测定，在扩展最大泡压法测定溶液表面张力的应用范围的同时，引导学生在学与做的过程中对所学知识进行分析运用；同时采用分子动力学方法，构建乙酰乙酸乙酯水溶液气液界面模型，研究溶质与溶剂间的相互作用，将理论模拟与实验教学充分结合，培养学生的化学发散思维，启发学生对基础理论知识的深入思考。“理论授课-实践验证-模拟分析”教学模式，以学生扎实、充分掌握理论知识为前提，通过激发学生的创新潜能，实现增强学生的课堂参与感及知识获得感的教学目标。该模式下，学生可以在“教”中掌握基础知识；在“学”中学习解决问题的方法；在“研”中提出问题、探索解决途径；在“究”中理论结合实验，揭示内在联系。“教”“学”“研”“究”的有机结合，有助于提升课堂教学质量，更重要的是积极创造条件，鼓励学生持续性地把“新”发现深究下去。

参 考 文 献

- [1] 张树永. 中国大学教学, **2023**, No. 10, 8.
- [2] 贾娜尔·吐尔逊, 王晶晶, 杜光明. 大学化学, **2023**, *38* (1), 22.
- [3] 边绍伟. 实验室科学, **2022**, *25* (2), 149.
- [4] 范丽岩, 刘亚菲, 史慧杰, 吴梅芬, 王晓岗, 许新华. 大学化学, **2023**, *38* (5), 265.
- [5] 王女, 赵勇, 刘兆阔, 田东亮. 大学化学, **2020**, *35* (3), 26.
- [6] 樊红霞, 柴成文, 王琛, 陆慧丽. 实验室科学, **2023**, *26* (2), 109.
- [7] 印永嘉, 奚正楷, 张树永. 物理化学简明教程. 第4版. 北京: 高等教育出版社, 2018: 286.
- [8] 宋淑娥. 基础化学实验(III)—物理化学实验. 第3版. 北京: 化学工业出版社, 2020: 145.
- [9] 毕韶丹. 物理化学实验. 北京: 清华大学出版社, 2018: 114.
- [10] 屈宜春, 李里. 实验科学与技术, **2018**, *16* (4), 88.
- [11] 刘维俊, 吴小梅, 徐瑞云. 物理化学实验. 第2版. 上海: 上海交通大学出版社, 2021: 190.
- [12] 谢治辉. 大学化学, **2018**, *33* (10), 110.
- [13] 陈琳. 丙二酸二乙酯联产乙酰乙酸乙酯的绿色合成工艺研究[硕士学位论文]. 上海: 华东理工大学, 2012.
- [14] 张恒, 贾春江, 宋其圣, 苑世领. 大学化学, **2023**, *38* (6), 189.
- [15] 张恒, 刘刚, 马莹, 宋其圣, 印志磊, 苑世领. 大学化学, **2019**, *34* (11), 82.
- [16] 董金龙, 刘雪娟, 赵婷婷, 文斌, 韩红斐. 大学化学, **2021**, *36* (6), 2007002.