

科教融合在化工专业化工热力学教学中的探索与实践 ——以化工物性数据估算和化学反应平衡为例

牛庆涛¹, 徐新尧¹, 于伟悦¹, 孟舒翔¹, 吕志果², 靳满满^{1,*}

¹ 济宁学院化学化工与材料学院, 山东 曲阜 273155

² 青岛科技大学化工学院, 山东 青岛 266000

摘要: 科教融合是科学教育迈向高质量发展的核心驱动力, 对于构建国家创新体系、促进新质生产力发展及培育科技创新人才至关重要。化工热力学, 化工专业的基石课程, 为工艺设计与实际操作提供坚实的理论基础, 但其复杂性成为学生深入理解和灵活应用的难点。针对其传统教学中理论表述抽象、实践与理论脱节及教学互动匮乏等问题, 本文创新性地将科教融合理念融入化工热力学教学之中, 以花瓣状介孔分子筛SBA-15基Co/Mo双金属有机框架材料催化环戊烯绿色氧化制戊二酸热力学深度剖析为切入点, 将化工热力学两大核心知识体系化工物性数据估算和化学反应平衡与科研前沿进行深度融合, 旨在有效解决传统化工热力学教学面临的挑战, 同时培养兼具创新精神和实践能力的化工专业人员和科技创新人才。

关键词: 科教融合; 化工专业; 化工热力学; 教学改革

中图分类号: G64; O6

Exploration and Practice of Science-Education Integration in Chemical Engineering Thermodynamics Teaching for Chemical Engineering Majors: A Case of Chemical Engineering Physical Property Data Estimation and Chemical Reaction Equilibrium

Qingtao Niu¹, Xinyao Xu¹, Weiyue Yu¹, Shuxiang Meng¹, Zhiguo Lv², Manman Jin^{1,*}

¹ School of Chemistry, Chemical Engineering and Materials, Jining University, Qufu 273155, Shandong Province, China.

² College of Chemical Engineering, Qingdao University of Science and Technology, Qingdao 266000, Shandong Province, China.

Abstract: Science-education integration is a driving force for the high-quality development of science education, playing a vital role in constructing the national innovation system, advancing emerging productivity, and nurturing talent for scientific and technological innovation. As a cornerstone course for chemical engineering majors, chemical engineering thermodynamics provides a solid theoretical foundation for process design and practical operations. However, its complexity presents challenges for students in terms of deep understanding and flexible application. To address the traditional challenges of abstract theoretical presentations, the disconnect between theory and practice, and limited teaching interaction, this paper innovatively incorporates the concept of science-education integration into chemical engineering thermodynamics teaching. Using the in-depth thermodynamic analysis of the green oxidation of cyclopentene to glutaric acid *via* petal-like mesoporous molecular sieve SBA-15-based Co/Mo bimetallic organic

收稿: 2024-12-2; 录用: 2024-12-23; 网络发表: 2024-12-30

*通讯作者, Email: 13864220985@163.com

基金资助: 国家自然科学基金(21978141); 山东省自然科学基金资助项目(ZR2020QB025, ZR2021QB145); 济宁学院“百名卓越人才”支持计划培育项目(2020ZYRC07, 2020ZYRC03)

framework materials as a case study, this approach integrates two core areas of chemical engineering thermodynamics (chemical property data estimation and chemical reaction equilibrium) with cutting-edge research. The goal is to address the challenges inherent in traditional teaching methods while simultaneously cultivating chemical engineering professionals and fostering scientific and technological innovation talent with both an innovative spirit and practical abilities.

Key Words: Science-education integration; Chemical engineering major; Chemical engineering thermodynamics; Teaching reform

化工热力学是化工专业的核心基础课程, 不仅承载着传授基本概念、原理及模型化方法的重要任务, 更强调培养学生将热力学理论精准应用于化学反应平衡调控、能量系统集成优化等复杂工程实践的能力。当前化工热力学传统教学显著且普遍存在的问题是理论表述的高度抽象性, 化工热力学理论体系既复杂又深奥, 涵盖广泛的数学公式、物理概念和化学原理。这些理论表述往往脱离实际, 学生在理解和把握核心概念时常常感到力不从心^[1]。理论与实践脱节同样是化工热力学教学中一个不容忽视的问题, 它严重制约了学生将所学知识有效应用于解决实际问题^[2]。此外, 缺乏有效的教学互动不仅导致课堂氛围沉闷乏味, 还极大地削弱了学生的学习兴趣 and 积极性^[3]。面对新时代对兼具创新思维与实践能力的复合型人才的需求, 这些教学瓶颈显然已经无法满足要求^[4,5]。因此, 教学方式的优化革新迫在眉睫。马小莉等^[6]探讨了高校化工热力学课程改革的原则和目标, 并提出了一些针对性的改革措施和建议。卢滇楠等^[7]等使用智谱清言预训练大预言模型进行人工智能助教模型的垂直训练, 实现了包括自适应出题、知识点答疑和手写公式识别等多样化功能, 证明了生成式人工智能赋能化工热力学课程教学的可行性。翁艳英等^[8]结合化工热力学课程教学特点及难点, 借助超星学习通, 搭建了成果导向教育理念下的化工热力学混合式教学模式。童张法等^[9]提出以“化学工程与工艺专业实验+工程实习+科研与大学生创新创业训练计划+工程学科竞赛+毕业设计+论文”为“五位一体”的化工热力学课程工程教学新理念。尽管目前在化工热力学教学研究领域已积累了相当数量的研究成果, 但这些研究大多侧重于理论框架的构建与阐述, 而对于如何将理论应用于具体教学场景、提供针对性的解读与指导方面, 尚存在较大的探索空间。

本文以花瓣状介孔分子筛SBA-15基Co/Mo双金属有机框架(MOF)材料催化环戊烯(CPE)绿色氧化制戊二酸(GAC)热力学深度剖析为例, 将科教融合理念融入化工热力学教学实践。此案例紧密围绕化工热力学两大核心知识体系: 化工物性数据估算及化学反应平衡^[10], 具体涉及: 针对CPE、环氧环戊烷(CPE-O)、1,2-环戊二醇(1,2-diol)、戊二醛(GA)及GAC热力学数据缺失, 采用基于物质分子结构的米田(ABWY)、杜克罗斯(Ducros)、罗济卡-多莫尔斯基(Rozicka-Domalski)基团贡献法, 计算其标准摩尔生成焓、标准摩尔熵和摩尔等压热容, 填补其热力学数据空白, 并以此为基础, 从自发性和平衡性双维度深入剖析CPE转化制GAC反应的热力学行为, 准确预测该反应的方向与限度。

1 科教融合的化工热力学教学解决问题的举措

1.1 科研案例融入课堂教学

以热力学第一定律为例, 该定律涉及的能量守恒、焓变及熵变等概念本身极具挑战性, 再加上与之紧密相关的复杂数学公式和推导过程, 更加凸显了化工热力学理论高度抽象的特点。为解决这一问题, 教师巧妙地将最新科研成果融入化工热力学课堂教学, 作为鲜活的教学案例。通过详细剖析这些案例, 不仅能使原本抽象复杂的理论知识变得生动具体, 还能让学生近距离地洞察科研工作的真实面貌, 包括其流程、所面临的挑战以及应对策略。这种将科研前沿与理论教学紧密结合的教学方法, 能够显著提升学生的实践认知, 点燃他们对科研探索的热情与兴趣, 进而激励学生积极投身于科研活动。同时, 这也为学生搭建了一个宝贵的平台, 使他们有机会尝试将课堂上学到的理论知识应用于解决现实世界的复杂问题, 从而在实践中深化理解, 促进知识的内化与迁移。

1.2 科研实验室开放与参与式学习

以化工过程能量转换与利用为例, 学生即使掌握了能量守恒定律和效率计算等理论知识, 但没有经过实际的化工过程模拟、设备操作或工艺流程设计等实践环节, 他们在面对真实工业场景中的能量优化、节能降耗等问题时, 也难以提出有效的解决方案。理论与实践的脱节, 无疑是化工热力学教学中一个亟待解决的关键问题。为此, 积极倡导并支持学生走进教师的科研实验室, 亲身参与实际的科研项目, 成为了一种极为高效的学习途径。在教师的悉心指导下, 学生得以从头至尾体验整个科研流程, 从最初的实验设计、数据收集, 直至最终的结果分析, 全面而深入地理解科研工作的每一个细微环节。这种沉浸式的参与不仅极大地促进了学生对化工热力学理论知识的深化理解, 还能够实践中锤炼他们的实验操作技能, 培育出严谨的科研思维方式。更重要的是, 通过与教师的直接沟通与协作, 学生能够获取到珍贵的科研实战经验与专业指导, 这些都将成为他们日后的学术深造与职业生涯铺设一条坚实的道路。

1.3 科研成果转化为教学资源

以相平衡教学为例, 若教师仅局限于理论讲解和公式推导, 而不鼓励学生进行主动思考与探讨, 那么学生很难将相平衡理论知识与实际化工过程应用联系起来, 这凸显了化工热力学教学缺乏有效互动的问题。同时, 有限的学时也往往成为实施互动式教学的障碍。为了克服这一难题, 教师积极地将个人科研成果转化为丰富多样的教学资源, 如精心制作的教学视频、教辅资料、在线数据库等。目前已形成教学资源的内容有流体的 $P-V-T$ 关系(状态方程 $P-V-T$ 关系求解)、流体混合物的热力学性质(偏摩尔量微分计算)、相平衡(汽液平衡)、化工过程的能量分析(热力学效率)及蒸汽动力循环与制冷循环(蒸汽动力循环)。这些转化而来的教学资源不仅能极大地丰富教学内容, 还能为学生提供更加多元化、灵活化的学习渠道。更重要的是, 它们成为了促进学生与教师之间有效互动的重要媒介。这些资源鼓励学生提出疑问、分享见解, 从而与教师形成积极互动。同时, 学生能够在教师引导下, 更深入地理解化工热力学理论知识, 并紧跟科研工作的最新动态和前沿技术。

2 科教融合的化工热力学教学案例

GAC是一种关键基础化工原料和有机合成中间体, 我国需求量逐年攀升(2022年, GAC市场规模为5.63亿人民币, 2023年, GAC市场规模为5.7亿人民币。数据来源: 全球和中国戊二酸市场发展调研与前景研究报告2024年)。当前工业技术主要采用回收法, 工艺繁琐、质量差且产量无法保证。近年来以CPE和 H_2O_2 为原料的清洁路线替代传统回收法生产高附加值的GAC技术, 更加符合现代工业绿色环保的发展要求^[11,12]。基于以上化工热力学教学面临的挑战及GAC生产实际, 特将花瓣状SBA-15基Co/Mo双金属MOF材料POM@CoMo-ZIF@SBA-15 (图1)催化CPE绿色氧化制GAC (图2)热力学深度剖析与化工热力学两大核心知识体系(第10章化学反应平衡及第11章化工物性数据估算^[10])进行深度融合。

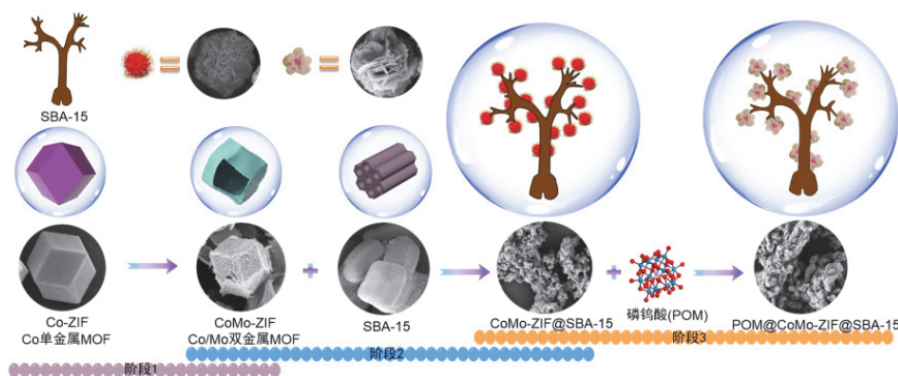
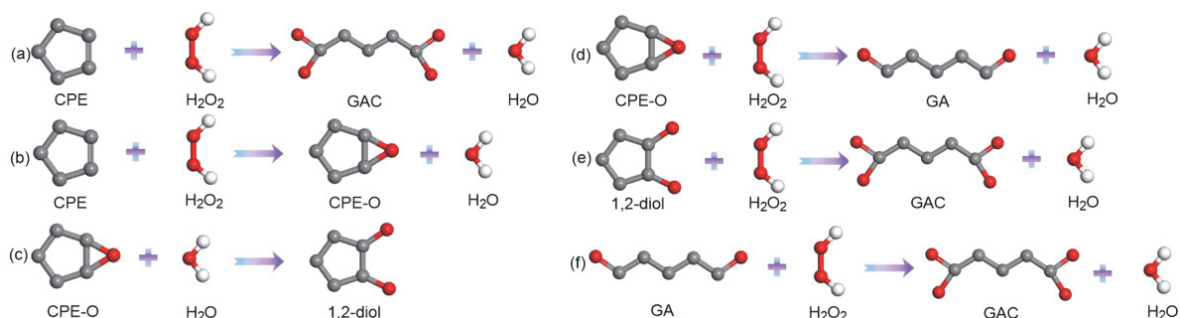


图1 POM@CoMo-ZIF@SBA-15材料制备示意图^[13]

图2 CPE氧化制GAC反应路线^[13]

在科教融合改革思路指导下，我们对花瓣状SBA-15基Co/Mo双金属MOF材料催化CPE绿色氧化制GAC热力学深度剖析教学过程进行了编排。课程导入：1) 背景引入。简述化工物性数据估算和化学反应平衡分析对工艺设计、生产条件选定及经济核算的关键作用，强调其在CPE氧化制GAC反应过程控制、自发趋势预测及反应限度描述中的重要性。2) 核心概念讲授。阐述标准摩尔生成焓、标准摩尔熵、摩尔等压热容、吉布斯自由能变及平衡常数等核心概念，引导学生探讨其在物性数据估算及化学反应平衡分析中的具体应用。3) 悬念设置。提出如何准确估算物性数据、化学反应能否向得到产品的方向进行、进行的限度怎样的问题，为本章节内容铺垫。夯实基础：1) 反应计量学和反应进度讲授。详细讲解反应计量学，包括反应方程式与化学计量数，引入反应进度概念，明确其衡量反应程度的作用。2) 标准自由焓变和平衡常数讲授。详述标准自由焓变的计算方法，揭示其如何预测化学反应的自发趋势，结合平衡常数，探讨化学反应平衡的影响因素和调控方法。3) 基本物性常数估算讲授。介绍实验测定、文献查阅和理论计算等物性常数估算方法，强调准确估算物性数据在热力学分析及反应优化中的重要性。科研实例融入：1) 实例分析。以花瓣状SBA-15基Co/Mo双金属MOF材料催化CPE绿色氧化制GAC为例，对该反应涉及组分进行物性数据估算和化学反应平衡分析，并引导学生思考热力学分析在其他领域的应用。2) 拓展讨论。组织小组讨论或辩论，激发学习热情与探索精神，深化对热力学原理的理解与应用。

针对科研实例融入的实践教学，我们首先系统估算CPE转化制GAC反应所有关键组分的热力学数据(包括标准摩尔生成焓、标准摩尔熵和摩尔等压热容等，这些数据将为后续化学反应平衡分析提供坚实基础)。随后，聚焦于自发性和平衡性两个核心维度，对该反应的热力学行为进行深入剖析，准确预测该反应的方向与限度。这种创新教学方法不仅能引导学生理解并掌握如何通过热力学原理来指导化学反应的优化与设计，还极大地激发了学生的学习热情和探索欲望，为培养具有创新精神与实践能力的化工人才奠定坚实基础。

2.1 化工物性数据估算——标准摩尔生成焓、标准摩尔熵和摩尔等压热容^[10,13]

298.15 K时，CPE-O、1,2-diol、GA和GAC的液态标准摩尔生成焓和液态标准摩尔熵可通过式(1)和(2)得到。

$$\Delta_f H_{l,298.15}^\theta = \Delta_f H_{g,298.15}^\theta + \int_{298.15}^T C_{p,l} dT - \Delta_v H_{298.15}^\theta \quad (1)$$

$$S_{l,m}^\theta = S_{g,m}^\theta + \int_{298.15}^T \frac{C_{p,l}}{T} dT - \frac{\Delta_v H_{298.15}^\theta}{T} \quad (2)$$

式中， $\Delta_f H_{l,298.15}^\theta$ 为液态标准摩尔生成焓， $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ ； $\Delta_f H_{g,298.15}^\theta$ 为气相标准摩尔生成焓， $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ ； $C_{p,l}$ 为摩尔等压热容， $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ ； T 为温度，K； $\Delta_v H_{298.15}^\theta$ 为汽化标准焓， $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ ； $S_{l,m}^\theta$ 为液态标准摩尔熵， $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ ； $S_{g,m}^\theta$ 为气相标准摩尔熵， $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ 。

1,2-diol、GA和GAC在298.15 K时的气相标准摩尔生成焓和气相标准摩尔熵可通过ABWY法^[14]

及式(3)和(4)估算, 各基团取代过程见表1-3。

$$\Delta_f H_{g,298.15}^\theta = \sum \Delta_f H_{i,298.15}^\theta \quad (3)$$

$$S_{g,m}^\theta = \sum S_{i,298.15}^\theta \quad (4)$$

式中, $\Delta_f H_{i,298.15}^\theta$ 为取代基团*i*的气相标准摩尔生成焓, $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$; $S_{i,298.15}^\theta$ 为取代基团*i*的气相标准摩尔熵, $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ 。

表1 1,2-diol的热力学基团贡献值(ABWY法)^[12]

1,2-diol	$\Delta_f H_{i,298.15}^\theta / (\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$	$S_{i,298.15}^\theta / (\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$	$a_i / (\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$	$b_i / (\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$	$c_i / (\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$
母体环戊烷	-77.29	293.08	-41.95	474.03	-182.71
甲基首批取代	-34.46	49.28	8.75	68.29	-23.19
	-17.88	24.03	-3.64	110.53	-53.26
-OH取代	-119.07	8.62	7.29	-65.73	24.45
-OH取代	-119.07	8.62	7.29	-65.73	24.45
-OH类型校正	-11.10	0.84	0.42	0	-0.42

^a: A = 甲基取代类型; B = 邻近最大类型, 1 = -CH₃, 2 = -CH₂-。

表2 GA的热力学基团贡献值(ABWY法)^[13]

GA	$\Delta_f H_{i,298.15}^\theta / (\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$	$S_{i,298.15}^\theta / (\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$	$a_i / (\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$	$b_i / (\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$	$c_i / (\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$
骨架甲烷	-74.90	186.31	16.71	65.65	-9.96
甲基首批取代	-9.84	43.33	-9.92	103.87	-43.54
甲基第二批取代					
A = 1, B = 1 ^a	-21.10	43.71	-3.68	98.22	-42.29
A = 1, B = 2	-20.60	38.90	1.47	81.48	-31.48
A = 1, B = 2	-20.60	38.90	1.47	81.48	-31.48
-C=O取代	-10.13	-54.43	17.12	-214.2	84.32
-C=O取代	-10.13	-54.43	17.12	-214.2	84.32
-C=O类型校正	-22.69	18.84	-3.60	6.74	-4.81

^a: A = 甲基取代类型; B = 邻近最大类型, 1 = -CH₃, 2 = -CH₂-。

表3 GAC的热力学基团贡献值(ABWY法)^[13]

GAC	$\Delta_f H_{i,298.15}^\theta / (\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$	$S_{i,298.15}^\theta / (\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$	$a_i / (\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$	$b_i / (\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$	$c_i / (\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$
骨架甲烷	-74.90	186.31	16.71	65.65	-9.96
甲基首批取代	-9.84	43.33	-9.92	103.87	-43.54
甲基第二批取代					
A = 1, B = 1 ^a	-21.10	43.71	-3.68	98.22	-42.29
A = 1, B = 2	-20.60	38.90	1.47	81.48	-31.48
A = 1, B = 2	-20.60	38.90	1.47	81.48	-31.48
-COOH取代	-350.39	53.05	7.91	29.22	-26.67
-COOH取代	-350.39	53.05	7.91	29.22	-26.67
-COOH类型校正	6.45	35.92	0.00	0.00	0.00

^a: A=甲基取代类型; B=邻近最大类型, 1 = -CH₃, 2 = -CH₂-。

CPE-O、1,2-diol、GA和GAC的标准汽化焓可通过Ducros基团贡献法^[14] (表4)和式(5)估算。

$$\Delta_v H_{298.15}^\theta = \sum n_i \Delta H_i \quad (5)$$

式中, ΔH_i 为基团*i*的汽化焓, $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ 。

表4 Ducros法基团值^[13]

组分	基团 <i>i</i>	数量 <i>n</i>	ΔH_i ($\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$)	组分	基团 <i>i</i>	数量 <i>n</i>	ΔH_i ($\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$)
CPE-O	C-(C) ₂ (H) ₂	3	4.98	GA	C-(C) ₂ (H) ₂	1	4.98
	C-(C) ₂ (O)(H)	2	1.97		C-(C)(CO)(H) ₂	2	2.97
1,2-diol	C-(C) ₂ (H) ₂	3	4.98	GAC	CO-(C)(H)	2	19.75
	C-(C) ₂ (O)(H)	2	1.97		环境校正	2	-1.56
	O-(C)(H)	2	31.80	C-(C) ₂ (H) ₂	1	4.98	
	环境校正	2	-3.60	O-(CO)(H)	2	37.87	
	支链校正	2	0.84	CO-(C)(O)	2	9.83	
				C-(C)(CO)(H) ₂	2	2.97	

CPE和H₂O的摩尔等压热容与温度的关系可通过273.15–373.15 K的摩尔恒压热容数据拟合得到^[15,16], H₂O₂的摩尔等压热容在此温度范围内为恒值。CPE-O、1,2-diol、GA和GAC的摩尔等压热容与温度的关系可通过Rozicka-Domalski基团贡献法^[14] (表5)及式(6)估算, 结果见表6。

$$C_{p,t} = R[A + B \frac{T}{100} + D(\frac{T}{100})^2] \quad (6)$$

式中, $A = \sum n_i a_i$; $B = \sum n_i b_i$; $D = \sum n_i d_i$ 。

表5 基团贡献值(Rozicka-Domalski法)^[13]

组分	基团 <i>i</i>	数量 <i>n_i</i>	<i>a_i</i>	<i>b_i</i> (K^{-1})	<i>d_i</i> (K^{-2})	组分	基团 <i>i</i>	数量 <i>n_i</i>	<i>a_i</i>	<i>b_i</i> (K^{-1})	<i>d_i</i> (K^{-2})
CPE-O	C-(C) ₂ (H) ₂	3	2.7972	-0.054967	0.10679	GA	C-(C) ₂ (H) ₂	1	2.7972	-0.054967	0.10679
	C-(C) ₂ (O)(H)	2	0.98790	0.39403	0.016124		C-(C)(CO)(H) ₂	2	6.6782	-2.4473	0.47121
	CPE	1	0.21433	-2.5214	0.63136		CO-(C)(H)	2	-3.8268	7.6719	-1.2711
1,2-diol	C-(C) ₂ (H) ₂	3	2.7972	-0.054967	0.10679	GAC	C-(C) ₂ (H) ₂	1	2.7972	-0.054967	0.10679
	C-(C) ₂ (O)(H)	2	2.2209	-1.4350	0.69508		O-(CO)(H)	2	-27.587	-0.16485	2.7483
	O-(C)(H) (diol)	2	5.2302	-1.5124	0.54075		CO-(C)(O)	2	29.246	3.4261	-2.8962
	环戊烷取代	2	0.29183	-1.5118	0.23172		C-(C)(CO)(H) ₂	2	6.6782	-2.4473	0.47121

表6 $C_{p,t} - T$ 的关系式^[13]

组分	$C_{p,t} \sim T$
CPE	$C_{p,t} = 112.71 - 0.8864T + 6.263 \times 10^{-3}T^2 - 1.463 \times 10^{-5}T^3 + 1.302 \times 10^{-8}T^4$
H ₂ O ₂	89.1
H ₂ O	$C_{p,t} = 837.401 - 9.099T + 0.0407T^2 - 8.105 \times 10^{-5}T^3 + 6.058 \times 10^{-8}T^4$
CPE-O	$C_{p,t} = 87.9765 - 0.15782T + 7.6446 \times 10^{-4}T^2$
GA	$C_{p,t} = 70.669 + 0.8641765T - 1.24127 \times 10^{-3}T^2$
1,2-diol	$C_{p,t} = 198.5172 - 0.75519T + 2.706598 \times 10^{-3}T^2$
GAC	$C_{p,t} = 161.8869 + 0.130774T + 6.263851 \times 10^{-4}T^2$

根据以上分析, CPE-O、1,2-diol、GA和GAC在298.15 K的气态标准摩尔生成焓、气态标准摩尔熵、汽化标准焓、液相标准摩尔生成焓、液相标准摩尔熵的估算结果见表7。

表7 $\Delta_f H_{g,298.15}^\theta$ 、 $S_{g,m}^\theta$ 、 $\Delta_v H_{298.15}^\theta$ 、 $\Delta_f H_{l,298.15}^\theta$ 、 $S_{l,m}^\theta$ 估算值^[13]

组分	$\Delta_f H_{g,298.15}^\theta / (\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$	$S_{g,m}^\theta / (\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$	$\Delta_v H_{298.15}^\theta / (\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$	$\Delta_f H_{l,298.15}^\theta / (\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$	$S_{l,m}^\theta / (\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$
CPE ^[17]	-	-	-	4.4	201.2
H ₂ O ₂ ^[17]	-	-	-	-187.8	109.6
H ₂ O ^[17]	-	-	-	-285.83	69.91
CPE-O	-122.44 ^[14]	26.22 ^[14]	18.88	-141.32	-37.10
GA	-189.99	261.13	47.3	-237.29	102.485
1,2-diol	-378.87	384.47	76.96	-455.83	126.345
GAC	-841.37	493.17	106.32	-947.69	136.571

2.2 化学反应平衡分析——吉布斯自由能变与平衡常数^[10,13]

针对任一反应, 均有式(7)–(11):

$$\Delta_r G_m^\theta = \Delta_r H_m^\theta - T \Delta_r S_m^\theta \quad (7)$$

$$\Delta_r H_m^\theta = \sum_i \nu_i \Delta_f H_m^\theta(i) \quad (8)$$

$$\Delta_f H_m^\theta(T) = \Delta_f H_{l,298.15}^\theta + \int_{298.15}^T C_{p,i} dT \quad (9)$$

$$\Delta_r S_m^\theta = \sum_i \nu_i S_m^\theta(i) \quad (10)$$

$$S_m^\theta(T) = S_{l,m}^\theta(298.15) + \int_{298.15}^T \frac{C_{p,i}}{T} dT \quad (11)$$

式中, $\Delta_r G_m^\theta$ 为吉布斯自由能变, $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$; $\Delta_r H_m^\theta$ 为标准摩尔反应焓, $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$; $\Delta_r S_m^\theta$ 为标准摩尔反应熵, $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$; ν_i 为化学计量系数。

273.15–373.15 K, 各反应(图1)的 $\Delta_r G_m^\theta$ 值如图3a所示。化学反应方向和平衡的判据为 $\Delta_r G_m^\theta \leq 0$ 。总反应(a)的 $\Delta_r G_m^\theta < 0$, 表示CPE氧化反应可自发进行。温度越低, $\Delta_r G_m^\theta$ 的绝对值越大, 表明低温有利于该反应。对于反应(b)–(f), $\Delta_r G_m^\theta < 0$, 表明这些反应在273.15–373.15 K可自发进行。而反应(c)的 $\Delta_r G_m^\theta > 0$, 意味着反应(c)不能自发进行, 需要高温来促使其发生。对于反应(d), 当 $T < 313.15$ K时, $\Delta_r G_m^\theta < 0$, 反应可自发进行。当 $T > 313.15$ K时, $\Delta_r G_m^\theta > 0$, 反应为非自发。

标准平衡常数 k^θ 是衡量化学反应限度的指标^[10]。根据式(12), 可得到各反应 $\ln k^\theta$ 随 T 变化的趋势(图3b)。

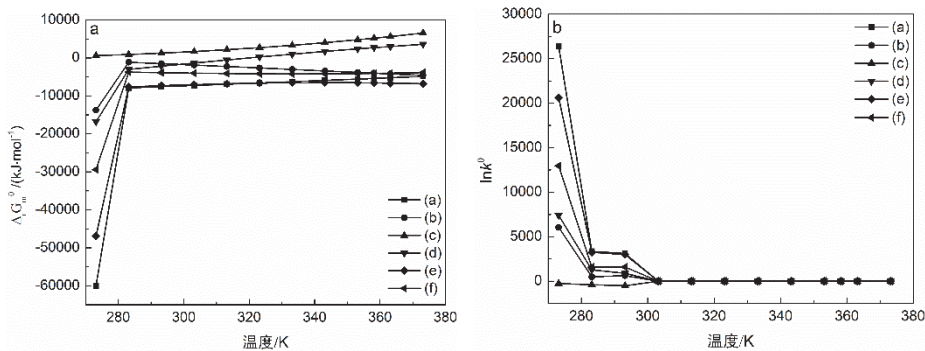


图3 $\Delta_r G_m^\theta$ vs T (a)和 $\ln k^\theta$ vs T (b)关系图^[13]

$$-\Delta_r G_m^\theta = RT \ln k^\theta \quad (18)$$

由图3b可知, 273.15–373.15 K, 所有反应 $\ln k^\theta$ 均随温度的升高而降低, 再次表明低温有利于这些反应。特别地, 生成GAC的反应(e)和(f)的 $\ln k^\theta$ 比其他反应更大, 表明这些反应更易生成GAC, 即在 H_2O_2 余量下, 当反应达到平衡时, CPE几乎可以完全转化为GAC。因此, 在实际操作中, 可通过添加过量 H_2O_2 来提高CPE的转化率和GAC的选择性。

3 科教融合的化工热力学教学效果与影响

通过以上教学实例学生熟练掌握了基团贡献法及相关公式的推导和应用, 准确预测了反应的方向与限度, 同时为解决实际化工问题提供了有力的工具。尤为值得一提的是, 学生将所学知识应用于实践, 为济宁某化工科技有限公司二乙胺转化制二乙基羟胺进行了详尽的热力学分析, 成功验证了该反应的工业可行性(图4, 273.15–373.15 K, $\Delta_r H_m^\theta < 0$, 放热反应, 降温对反应有利; 273.15–373.15 K, $\Delta_r G_m^\theta < 0$, 反应可自发进行; 273.15–373.15 K, k^θ 值数量级很大, 反应达到平衡时几乎能够进行到底), 这一成果不仅彰显了科教融合在化工热力学教学中取得的显著成效, 而且凸显了科教融合理念在促进产学研深度融合方面的独特优势。

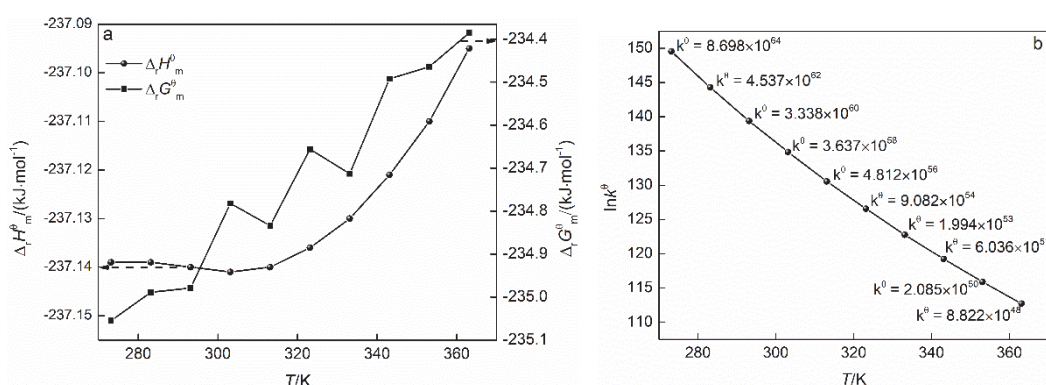


图4 $\Delta_r H_m^\theta / \Delta_r G_m^\theta$ vs T (a)和 $\ln k^\theta$ vs T (b)关系图

项目的开展获得2024年省级大学生创新创业计划项目(S202410454002)资助, 并在 *Molecular Catalysis* 和 *Materials Research Bulletin* 期刊成功发表2篇SCI论文 (*Molecular Catalysis*, 2024, 564, 114273; *Materials Research Bulletin*, 2024, 179, 112927), 这不仅是对学生学术能力的肯定, 也是科教融合教学在实际应用中取得显著成效的有力佐证。在全球科技竞争愈演愈烈的当下, 科学教育的高质量发展已成为国家创新体系构建、新质生产力激发以及科技创新人才培养的核心驱动力^[18,19]。科教融合, 作为支撑这一宏伟蓝图的战略支柱, 对于强化国家战略科技实力、突破核心技术瓶颈、加速实现高水平科技自立自强具有不可估量的价值。在国家科技创新体系的宏观布局下, 科教融合机制正致力于打造一个紧密相连、高效协同的科学教育体系, 旨在推动科学教育育人模式的深刻变革, 弘扬科学精神, 为国家的科技进步与创新提供坚实支撑。

4 结语

本文以花瓣状SBA-15基Co/Mo双金属MOF材料催化CPE绿色氧化制GAC热力学深度剖析为例, 探索并实践了科教融合理念在化工热力学教学中的应用。这一实践不仅有效解决了传统化工热力学教学中理论表述抽象、实践与理论脱节及教学互动匮乏等问题, 还极大地增强了学生对化工热力学课程的兴趣与参与度。科教融合的教学实践展现了学生在科学探索中的热情与精神, 对培养具有创新精神和实践能力的科技创新人才具有重要意义, 未来将继续深化科教融合在化工热力学及其他专

业课程中的应用, 为培养化工人才、推动化工行业的科技进步和创新发展贡献力量。

参 考 文 献

- [1] 吕玲红, 冯新, 刘畅, 杨祝红, 王昌松, 陆小华, 武文良. 大学化学, **2010**, *25* (5), 42.
- [2] 丁雪, 刘熠斌, 乔柯, 宋春敏, 杨朝合. 化学教育, **2016**, *37* (16), 62.
- [3] 刘泉, 杨忠连, 圣宗强. 化学教育(中英文), **2024**, *45* (22), 84.
- [4] 荣春光, 陈立钢, 张秀成, 向兴德, 周志强. 大学化学, **2023**, *38* (5), 254.
- [5] 黎小辉, 张泽, 崔静怡, 殷娟娟. 大学化学, **2024**, *39* (7), 368.
- [6] 马小莉, 杨灿灿. 大学教育, **2024**, (15), 57.
- [7] 卢滇楠, 党漾, 王宏宁, 黎叙锐. 清华大学教育研究, **2024**, *45* (5), 89.
- [8] 翁艳英, 吴春燕, 郑燕菲, 徐英, 张贞发. 创新创业理论研究与实践, **2024**, *7* (22), 40.
- [9] 童张法, 陈小鹏, 梁杰珍, 王琳琳, 邹昀, 韦小杰. 中国大学教学, **2017**, *10*, 77.
- [10] 陈钟秀, 顾飞燕, 胡望月. 化工热力学. 北京: 化学工业出版社, 2021: 247–297.
- [11] Niu, Q. T.; Liu, G. D.; Lv, Z. G.; Si, C. D.; Han, H.; Jin, M. M. *Mol. Catal.* **2021**, *504*, 111465.
- [12] 靳满满, 吕志果, 牛庆涛. 大学化学, **2024**, *39* (11), 108.
- [13] Jin, M. M.; Meng, S. X.; Liu, G. D.; Si, C. D.; Lv, Z. G.; Han, H.; Niu, Q. T. *Mol. Catal.* **2024**, *564*, 114273.
- [14] 马沛生. 化工数据. 北京: 化学工业出版社, 2003: 106–162.
- [15] 刘光启, 马连湘, 刘杰. 化学化工物性数据手册(有机卷). 北京: 化学工业出版社, 2002: 243.
- [16] 符斌. 常用化学手册. 北京: 地质出版社, 1997: 311–312.
- [17] 李梦龙. 化学数据速查手册. 北京: 化学工业出版社, 2003: 106–131.
- [18] 左彪, 张旖芝, 陈铮凯, 田厚宽, 王勇能, 张伟, 王伟祖, 郑旭明, 王新平. 大学化学, **2024**, *39* (11), 38.
- [19] 张卓旻, 余忠宁, 陈颖诗, 代寒冰, 李攻科. 大学化学, **2021**, *36* (9), 2106020.