

从热力学角度解读脱氢芳构化反应在塑料废弃物价值重生中的教学设计与实践

周子越^{1*}, 王 旺¹, 黄嘉烨¹, 王 群^{1#}, 李 杨¹, 方宝东², 卢松涛¹, 汪新智¹, 吴晓宏¹

¹哈尔滨工业大学化工与化学学院, 黑龙江 哈尔滨

²上海卫星装备研究所, 上海

收稿日期: 2026年6月15日; 录用日期: 2026年7月13日; 发布日期: 2026年7月20日

摘 要

以塑料废弃物转化为高价值化学品这一前沿热点为例, 教学团队构建了“原理框架 - 案例解构 - 教学转化”的情境, 探索了一种基于热力学原理解析前沿成果的教学实施路径。首先以吉布斯自由能判据(反应自发性)为核心建立原理框架, 继而运用该框架系统分析《科学》(*Science*)期刊中聚乙烯催化转化为高值化学品的突破性工作, 揭示其通过脱氢(芳构化)与加氢(氢解)反应串联耦合实现热力学驱动的设计思路; 同时, 指导学生开展“废弃口罩制备荧光碳点”教学实验, 在实践中阐明热力学条件对材料功能化的驱动作用, 构建了“教学 - 科研 - 学习”融合的闭环模式。该模式促使学生运用课本知识解析高水平文献, 驱动学生提升实际问题解决能力, 为工程基础课程将前沿科研融入教学提供了可参考的实践路径。

关键词

物理化学教学, 热力学, 芳构化, 塑料废弃物, 反应耦合

Teaching and Practice through a Thermodynamic Interpretation of Dehydroaromatization in Plastic Waste Revival

Ziyue Zhou^{1*}, Wang Wang¹, Jiaye Huang¹, Qun Wang^{1#}, Yang Li¹, Baodong Fang², Songtao Lu¹, Xinzhi Wang¹, Xiaohong Wu¹

¹School of Chemistry and Chemical Engineering, Harbin Institute of Technology, Harbin Heilongjiang

²Shanghai Institute of Satellite Equipment, Shanghai

*第一作者。

#通讯作者。

文章引用: 周子越, 王旺, 黄嘉烨, 王群, 李杨, 方宝东, 卢松涛, 汪新智, 吴晓宏. 从热力学角度解读脱氢芳构化反应在塑料废弃物价值重生中的教学设计与实践[J]. 教育进展, 2026, 16(7): 1080-1087.

DOI: 10.12677/ae.2026.1671471

Received: June 15, 2026; accepted: July 13, 2026; published: July 20, 2026

Abstract

Taking the conversion of plastic waste into high-value chemicals as an example, this paper proposes a “theoretical framework - case deconstruction - teaching transformation” pathway. It explores a teaching model based on thermodynamic analysis of cutting-edge research. First, a theoretical framework centered on the Gibbs free energy criterion is established. This framework is then used to analyze the breakthrough work on catalytic polyethylene upcycling reported in *Science*, revealing how thermodynamically spontaneous conversion is achieved through coupled dehydrogenation (aromatization) and hydrogenation (hydrogenolysis) reactions. Meanwhile, students are guided to carry out a teaching experiment on “preparing fluorescent carbon dots from waste masks”. This experiment demonstrates how thermodynamic conditions drive material functionalization. A closed-loop “teaching-research-learning” model is established, which helps students connect textbook knowledge with advanced literature and apply it to solve practical problems. This work provides a practical reference for integrating research and education in fundamental engineering courses.

Keywords

Physical Chemistry Teaching, Thermodynamics, Aromatization, Plastic Waste, Reaction Coupling

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

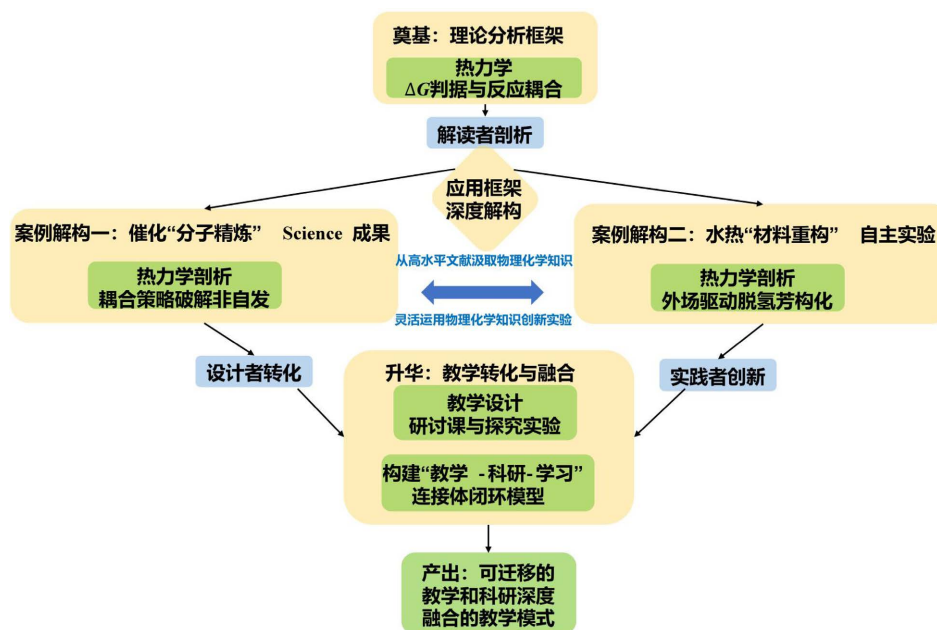


Figure 1. Schematic diagram of the core logic and framework

图 1. 本文核心逻辑与框架示意图

在高等工程教育深化改革、科教融汇成为重要趋势的背景下，将前沿科研成果引入本科教学、实现科研反哺教学，已成为培养创新型人才的重要途径[1]-[3]。物理化学是化工及相关专业的核心基础课程，其热力学原理为理解物质变化与能量转化提供了基本工具。然而，传统教学中学生常将抽象理论(如吉布斯自由能判据)停留在公式计算层面，难以用于解决实际问题；同时，前沿科研成果的教学引入往往止步于知识性介绍，未能揭示其背后的原理与设计思路，导致教学与科研未能深度融合。因此，教学与科研的深度融合需要兼具学术性和实践性的双重特点。

为此，本文提出并实践了一种基于热力学原理解析前沿成果的教学任务情境(见图 1)，核心是：教师首先作为“解读者”，运用热力学原理深度剖析前沿科研成果；进而作为“设计者”，将分析过程转化为渐进式教学案例；引导学生作为“实践者”，从“变废为宝”的感性认知出发，自主开展口罩制碳点实验，在实践后结合文献研讨深化原理理解，最终形成“教学 - 科研 - 学习”的闭环。

2. 理论分析框架的建立：热力学作为解读复杂过程工具

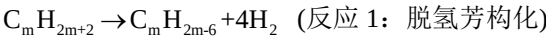
在物理化学中，热力学从能量与平衡角度决定了反应“能否发生”及其“方向与限度”；吉布斯自由能变 ΔG 是判断反应可行性的核心判据。本文旨在借助文献案例和实验案例的深度解构，系统梳理热力学因素对于反应可能性的根本性作用。

3. 案例深度解构一：Science 中的热力学原理——从“不可能”到“可能”

塑料化学惰性源于其牢固的 C-C 键，实现高选择性、无需外加昂贵氢源、反应条件温和的“升级回收”，是领域内的核心目标。美国加州大学 Scott 团队在《科学》(Science)上报道的将聚乙烯“一锅法”转化为长链烷基芳烃等高价值化学品的工作，实现了升级回收目标[4]。本节将深入解构这一成果背后的物理化学中热力学原理。

3.1. 单一反应的热力学非自发性

首先，从热力学视角审视这一过程的核心——脱氢芳构化反应。聚乙烯可以看作是一种长链烷烃 (C_mH_{2m+2}) 转化为长链烷基芳烃 (C_mH_{2m-6})，其净反应为：



根据吉布斯自由能判据，首先需要判断该反应在温度(280℃)下能否自发进行。这里采用 Benson 基团加和法[5]进行热力学计算(该方法基于有机基团贡献值，不同于教材中基于纯物质的热力学数据，见图 2)。

Group label	Chemical identity	$\Delta_f H^\circ_{gas,est}$ kJ/mol	$S^\circ_{gas,est}$ J/mol K	Estimated gas-phase increments						
				C_p						
				J/mol K temperature (K)						
				300	400	500	600	800	1000	1500
g1	-CH ₂ -	-21.0	39.4	23.0	29.1	34.5	39.1	46.3	51.6	59.4
g2	-CH ₃	-42.7	127.2	25.9	32.8	39.3	45.2	54.5	61.8	73.6
g3	C _{Ar} -C	23.0	-32.1	11.2	13.1	15.4	17.4	20.8	22.8	25.0
g4	C _{Ar} -H	14.0	48.2	13.6	18.6	22.8	26.4	31.5	35.2	40.7
g5	Ar-C _α H ₂ -	-20.0	39.1	24.4	31.8	37.6	41.9	48.1	52.5	57.6
g6	Ring strain correction	3.0	-25.0	4.6	6.3	5.4	5.0	3.8	2.9	-0.4
gH	H ₂	0.0	130.7	28.9	29.2	29.2	29.3	29.6	30.2	32.3

Figure 2. Standard thermodynamic molar function values of each group g in the Benson method
图 2. Benson 基团加和法中各基团 g 的热力学标准摩尔函数值[4]

依据上表，可计算反应 I 中反应物和产物分子的标准生成焓 $\Delta_f H^\circ$ 和标准熵 S° ：

1. $C_m H_{2m+2}, g = (m-2) g_1 + 2 g_2$ (两个 $-CH_3$ 和 $(m-2)$ 个 $-CH_2$)

2. $C_m H_{2m-6}, g = (m-10)g_1 + 2 g_2 + 2 g_3 + 4 g_4 + 2 g_5 + g_6$

3. $H_2, g = 4 g_H$

由此可以计算该反应在常温和标准大气压下的反应焓变和熵变:

$$\text{反应焓变} = -8\Delta_f H^\circ(g_1) + 2\Delta_f H^\circ(g_2) + 4\Delta_f H^\circ(g_3) + 2\Delta_f H^\circ(g_4) + \Delta_f H^\circ(g_5) + 4\Delta_f H^\circ(g_6) + 4\Delta_f H^\circ(H_2) = 8 \times 21.0 + 2 \times 23.0 + 4 \times 14.0 - 2 \times 20.0 + 3.0 = 233.0 \text{ kJ/mol}$$

$$\text{反应熵变} = -8S^\circ(g_1) + 2S^\circ(g_2) + 4S^\circ(g_3) + 2S^\circ(g_4) + S^\circ(g_5) + 4S^\circ(g_6) + 4S^\circ(H_2) = 8 \times -(39.4) - 2 \times 32.1 + 4 \times 48.2 + 2 \times 39.1 - 25.0 + 4 \times 130.7 = 389.4 \text{ J/mol K}$$

按照基尔霍夫定律, 需要计算反应温度 280°C (553 K) 下反应焓变和熵变。但定压摩尔热容在该文未给出近似值计算, 而是给出了各个温度下的数值, 因此不能看作定值, 而是应当使用积分。但由于计算条件限制, 现取 C_p 为 400 K 的值分别为 29.1 J/mol K 、 13.1 J/mol K 、 18.6 J/mol K 、 31.8 J/mol K 、 6.3 J/mol K 和 29.2 J/mol K 。

$$\begin{aligned}\Delta H_{280^\circ\text{C}} &= 233 \text{ kJ/mol} + \int_{298 \text{ K}}^{553 \text{ K}} C_p dT \\ &= 233 + [(553 - 298) \times (2 \times 13.1 - 8 \times 29.1 + 4 \times 18.6 + 2 \times 31.8 + 6.3 + 4 \times 29.2)] / 1000 \\ &= 251.7 \text{ kJ/mol}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Delta S_{280^\circ\text{C}} &= 389.4 \text{ kJ/mol K} + \int_{298 \text{ K}}^{553 \text{ K}} \frac{C_p}{T} dT \\ &= 389.4 + (2 \times 13.1 - 8 \times 29.1 + 4 \times 18.6 + 2 \times 31.8 + 6.3 + 4 \times 29.2) \times \ln(553/298) \\ &= 434.8 \text{ kJ/mol K}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}G_{280^\circ\text{C}} &= \Delta H_{280^\circ\text{C}} - T \Delta S_{280^\circ\text{C}} \\ &= 251.7 - 553 \times 434.8 / 1000 \\ &= 11.3 \text{ kJ/mol}\end{aligned}$$

计算的焓变与文献值基本一致, 但由于热容取值简化, 熵变计算存在偏差, 导致吉布斯自由能的计算值 (11.3 kJ/mol) 与文献值 ($+31 \text{ kJ/mol}$) 略有差异。

按照反应 1 仅将线性聚乙烯转化为烷基芳烃, 是一个强烈的吸热反应 ($\Delta H^\circ = 233.0 \text{ kJ/mol} > 0$), 该步骤的吸热特性源于芳香环形成时系统能量增加, 需外界提供能量驱动反应。相关研究也证实, 聚烯烃的芳构化过程具有典型的吸热特征^[6]。尽管产物分子数增加熵增 ($\Delta S > 0$), 但在 280°C 下, 该反应的吉布斯自由能变 $\Delta G > 0$ (约为 $+31 \text{ kJ/mol}$)。热力学结论是明确的: 单纯聚乙烯脱氢芳构化反应是非自发的。

3.2. 反应耦合策略的热力学实现

如果目标反应本身在热力学上不利, 科学家是如何实现将“非自发”转变成“自发”的呢? 关键在于反应耦合。反应耦合虽是热力学调控的经典策略, 在很多无机化学教材中已有先例, 但 Scott 团队将其创造性地应用于塑料升级回收体系, 通过 $\text{Pt}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ 催化剂的精巧设计, 使这一经典原理在实际转化中展现出无需外加氢源、温和条件下一锅法获得高值产物的巨大潜力。Scott 团队设计的并非一个单一反应, 而是两个反应的耦合(如图 3):

反应 1: 芳构化(Aromatization): $C_m H_{2m+2} \rightarrow C_m H_{2m-6} + 4H_2$ ($\Delta G_1^\circ > 0$, 非自发)

反应 2: 氢解(Hydrogenolysis): $C_{m+n} H_{2(m+n)+2} + H_2 \rightarrow C_m H_{2m+2} + C_n H_{2n+2}$ ($\Delta G_2^\circ < 0$, 自发)

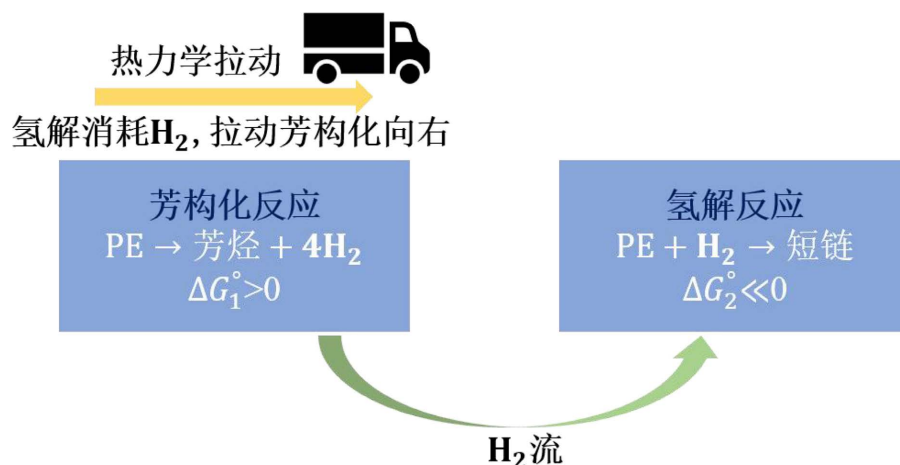


Figure 3. Schematic diagram of coupling reactions
图 3. 反应耦合示意图

关键的是，氢解反应是一个放热反应，且其吉布斯自由能变 $\Delta G^\circ \ll 0$ (约为 -74 kJ/mol)，是一个强烈的自发过程。结合芳构化和氢解两步反应的热力学数据，可以计算耦合体系的总吉布斯自由能 $\Delta G^\circ < 0$ 。

芳构化反应的产物(H_2)，恰恰是氢解反应的反应物。根据勒夏特列原理，移除产物会使平衡向正方向移动，从而驱动芳构化反应持续进行。上述热力学计算完美地验证了反应耦合的策略：根据文献数据估算，当芳构化产生的氢气被氢解反应消耗掉一部分时，总反应即可自发进行(280°C , $\Delta G^\circ = 0$)。而实验数据表明，实际消耗的 H_2 超过了 90%，远高于热力学自发所需的最小值。因此，是氢解反应强大的热力学驱动力(ΔG°)，“拉动”了原本不利的芳构化反应，使总反应得以顺利进行。这个过程无需额外添加氢气，实现了反应物与能量层面的自给自足。

4. 案例深度解构二：自主实验中的原理运用——从“条件”到“功能”

与 Scott 团队催化转化不同，水热法是一种“材料重构”路径。它不再保留塑料的分子结构，而是将其作为碳源，通过高温高压处理彻底重构其物质形态，获得具有全新功能的纳米材料(如荧光碳点)。这一路径虽然看似“大刀阔斧”，但其成功同样深刻地依赖于热力学条件过程，是物理化学原理在材料制备中的直接体现。

4.1. 热力学条件分析：外场能量驱动体系重构

水热反应的根本驱动力，源于反应体系所处的高温高压热力学条件。高温(180°C)远高于聚丙烯的玻璃化转变温度，其核心作用体现在两方面：一是提供足够的热能，克服聚丙烯中 C-C 键和 C-H 键断裂所需的能量，从而启动聚合物链的解聚；二是在密闭体系中，高温高压导致水进入亚临界/超临界状态(参照水的相图)。此时水的性质发生剧变：离子积增大、介电常数降低、传质能力增强。这一特殊流体兼具高反应活性与优异传输性能，使得在常温常压下难以发生的碳化、缩合、芳构化等强吸热过程($\Delta H \gg 0$)成为可能。高温与水热环境共同提供了足够的热力学驱动力，使聚丙烯解聚、碳化并形成具有芳香结构的碳核，最终获得表面富含官能团的荧光碳点。

4.2. 思路对比与实验流程简述

本课题组指导学生利用废弃医用口罩(主要成分为聚丙烯)为原料，采用一步水热法成功制备了荧光碳量子点(CDs)。如图 4 所示，其流程极为简洁：将聚丙烯无纺布碎片置于高压反应釜中，于 180°C 下反

应 12 小时, 经后续纯化即可获得在紫外光照射下发出明亮蓝色荧光的碳点水溶液(图 4), 所得碳点单分散性良好, 尺寸均匀分布在 3~4 nm 之间, 具有丁达尔效应(胶体特性)。碳点表现出选择性金属离子淬灭特性(图 5(a)), 不同金属离子荧光光谱中, 只有 CrO_4^{2-} 光谱峰强度急剧下降(图 5(b))。

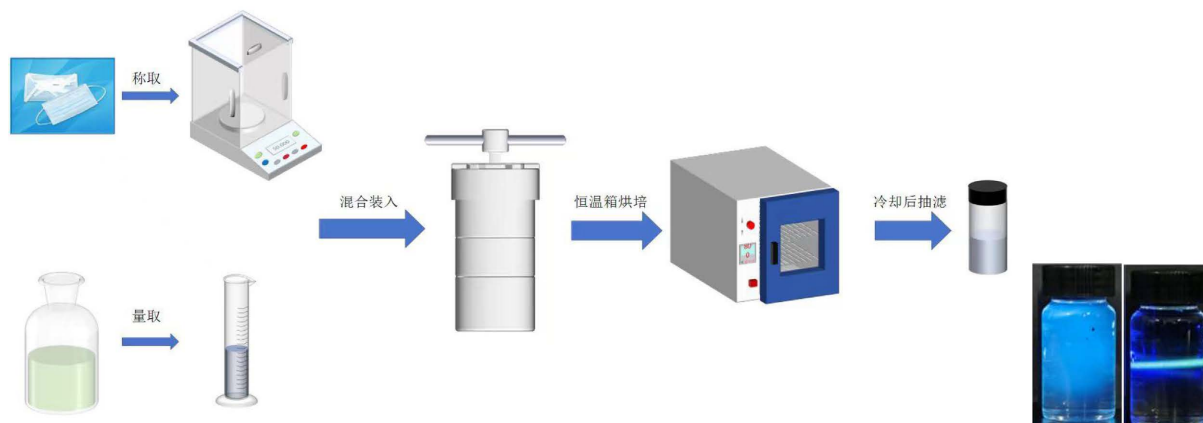


Figure 4. Flowchart of carbon dot preparation by hydrothermal route and its fluorescence and Tyndall effect under UV light
图 4. 水热法制备碳点流程图及其在紫外光照射下的荧光和丁达尔效应

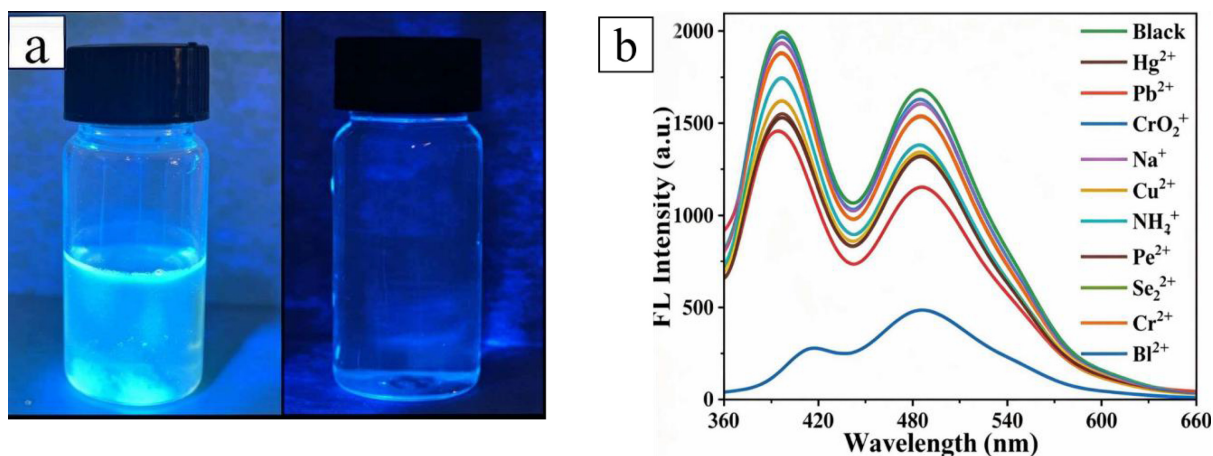


Figure 5. Response of carbon dots to different metal ions; (a) Fluorescence quenching; (b) Effect of different metal ions on fluorescence intensity

图 5. 碳点对不同金属离子的响应; (a) 荧光淬灭现象; (b) 不同金属离子对荧光强度的影响

与第 2 节通过反应耦合实现内部热力学驱动的催化转化不同, 本节的水热重构主要依赖外场热力学条件(高温高压)直接驱动非自发反应。两种路径虽机理迥异, 但均运用热力学原理解析复杂转化过程——前者通过反应耦合实现“自驱动”, 后者借助外部能量(高温高压、光场或电场)实现“他驱动”, 共同为塑料废弃物的价值重生提供了不同的实现路径。

5. 从解构到建构：教学转化与融合

5.1. 教学设计与实施：从研讨课到探究实验

基于前述分析, 教师设计了两类互补的教学活动, 将知识传授与能力培养相结合。

在理论教学环节, 将 Scott 团队的工作创设为“反应耦合与催化”研讨环节, 安排在“化学平衡”核

心章节之后,引导学生以 3~5 人小组形式,从热力学自发性分析出发(计算单一芳构化反应的 $\Delta G > 0$),自主探索通过反应耦合实现过程自发的策略(引入氢解反应)。考核采取教师评分和小组互评形式,这一情境训练学生运用基础理论工具解决现实复杂科学问题的系统思维。

在实验实践环节,将“废弃口罩制备碳点”拓展为一个开放式探究项目。引导性问题包括:(1) 高温条件如何为 C-C/C-H 键断裂提供能量,克服反应能垒?(2) 高压水热环境(亚临界/超临界水)如何改变反应体系的热力学状态,使原本非自发的碳化、芳构化过程得以发生?(3) 上述热力学条件与“反应耦合”策略有何异同?将围绕这些问题,对自主实验进行深度热力学解构,展示同一套原理框架在材料重构路径中的应用。学生不再照方抓药,而是在理解水热法基本热力学原理的基础上,自主设计实验,探究反应温度或时间对碳点荧光性能的影响。通过亲手建立“工艺条件-结构-性能”的关联,并运用物理化学原理解释实验现象,学生得以完成从理论认知到实践探索的完整训练,培养其科学探究与工程实践能力。多数学生反馈“实验和书本知识紧密联系,开拓思路,对知识点更深刻理解”,“直接接触并解析《科学》级成果”,能激发学习兴趣,切身感受基础理论的力量。

5.2. 构建“教学-科研-学习”连接体闭环模型

上述教学设计源于对科研前沿的原理解析,其价值体现在多个方面。首先,深化知识联结。以吉布斯自由能判据、反应耦合为核心,系统剖析 Science 中的工作,使学生将抽象的 ΔG 概念与“无需外氢”、“一锅法”、“荧光调控”等具体设计关联起来,打破知识孤岛。其次,提供完整的思维范式训练,让学生经历“分析问题→提出策略→验证方案→评价优化”的完整工程思维过程。

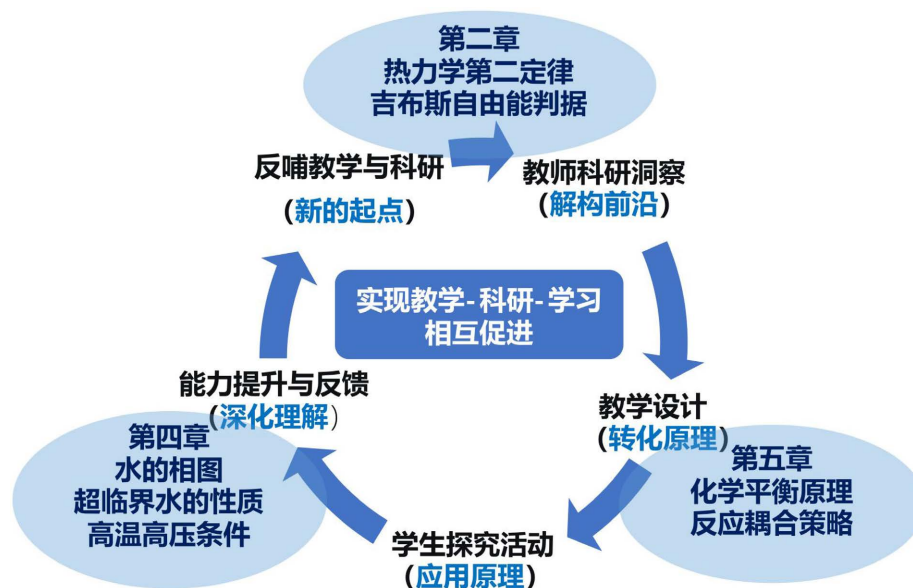


Figure 6. The dynamic process of integrating teaching and research and the comprehensive application of physical chemistry knowledge points

图 6. 教学与科研融合的动态过程及综合运用的物理化学知识点

这一“以原理贯通前沿与基础”的教学情境方式,有效解决理论学习与应用实践脱节的痛点。其成功实施的关键,在于构建一个清晰的闭环路径(图 6)。该模型揭示了教学和科研深度融合的动态过程:基于物理化学课程中第二、四和五章知识点,教师首先深度解构前沿科研,提炼其核心设计;继而将其转化为渐进式教学设计,引导学生在此框架下主动探究与知识建构;最终实现学生能力提升,并反馈于教

学与科研的持续改进。从案例解构到教学设计的全过程，正是这一“教学－科研－学习”融合模型在课程层面的具体实践。

6. 结语

本文所探索的方法具有可迁移性，其核心通过原理解析前沿成果反哺教学，可适用于电催化合成、二氧化碳资源化等与物理化学紧密相关的领域。参与教学实践的 10 名本科生获全国大学生节能减排社会实践二等奖、全国高校双碳战略征文二等奖，在 *Talanta* 和 *Langmuir* 等期刊发表 SCI 论文，2 人直博，1 人获校优秀研究生论文。这些成效表明，该模式为工程基础课程推进教学与科研深度融合、培养创新型人才提供了具有参考价值的实践路径。

基金项目

2025 年教育部学位中心主题案例(ZT-2510213008)。

参考文献

- [1] 卢晓中. 科教融汇视角下高校教学与科研更好结合刍论[J]. 高校教育管理, 2023, 17(6): 1-10.
- [2] 卓泽林, 周文伟, 黎泓燕. 面向科技自立自强的研究型大学科教融合: 时代要义、逻辑转向与实现进路[J]. 教育发展研究, 2024, 44(7): 54-62.
- [3] 严纯华. 科教融汇赋能拔尖创新人才培养[J]. 中国高教研究, 2025(2): 1-4.
- [4] Zhang, F., Zeng, M., Yappert, R.D., Sun, J., Lee, Y., LaPointe, A.M., *et al.* (2020) Polyethylene Upcycling to Long-Chain Alkylaromatics by Tandem Hydrogenolysis/Aromatization. *Science*, **370**, 437-441. <https://doi.org/10.1126/science.abc5441>
- [5] 谭瑾, 陈敏伯, 郑崇直. BENSON 法预测标准生成焓的改进与程序实现[J]. 计算机与应用化学, 1999(6): 426-434.
- [6] Miao, Y., Qian, X., Wang, J., Kang, L., Jiang, C., Lin, Z., *et al.* (2026) Suppressing Hydrogen Transfer and Aromatization Reactions Enables Efficient Photothermal Recycling of Polyethylene into Platform Olefins. *Advanced Materials*, **38**, e19453. <https://doi.org/10.1002/adma.202519453>