

反应动力学模拟在环境化学实验教学中的应用

吉冰冰*, 郭 振, 张弈辉, 孙红光, 尹恩强

武汉大学资源与环境科学学院, 湖北 武汉

收稿日期: 2026年7月3日; 录用日期: 2026年8月3日; 发布日期: 2026年8月11日

摘 要

本文以苯在Fenton体系中的氧化反应为例, 使用反应动力学模拟软件SimBiology模拟了Fenton反应产生羟基自由基及其氧化苯的反应过程, 测定了体系中反应物 Fe^{2+} 离子和产物苯酚的浓度, 并检验了模拟结果与实验结果的一致性。该实验将传统化学实验与计算机模拟结合, 可巩固和提升学生对反应动力学和羟基自由基反应特性等理论课教学内容的学习; 实验条件和操作技能要求适中, 课时安排紧凑, 满足环境化学综合性实验教学需求, 适于推广。

关键词

化学动力学模拟, 实验教学, Fenton体系, 羟基自由基, 速率常数

Application of Reaction Kinetics Simulation in Environmental Chemistry Experiment Teaching

Bingbing Ji*, Zhen Guo, Yihui Zhang, Hongguang Sun, Enqiang Yin

School of Resource and Environmental Sciences, Wuhan University, Wuhan Hubei

Received: July 3, 2026; accepted: August 3, 2026; published: August 11, 2026

Abstract

This study uses the oxidation of benzene in a Fenton system as a case to demonstrate the use of SimBiology for simulating hydroxyl radical generation and benzene oxidation. Concentrations of Fe^{2+} and phenol were measured to validate the simulation against experimental results. Combining wet chemistry with computational modeling, this experiment reinforces students' understanding of kinetics and radical chemistry. Its modest skill requirements and efficient time allocation make it a

*通讯作者。

文章引用: 吉冰冰, 郭振, 张弈辉, 孙红光, 尹恩强. 反应动力学模拟在环境化学实验教学中的应用[J]. 教育进展, 2026, 16(8): 442-449. DOI: 10.12677/ae.2026.1681650

practical, transferable addition to comprehensive environmental chemistry lab curricula.

Keywords

Chemical Kinetics Simulation, Experimental Teaching, Fenton System, Hydroxyl Radicals, Rate Constant

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

化学反应动力学是大学化学、物理化学、环境化学等课程的重要教学内容之一。在这些课程配套的实验教学中,也常常包括反应动力学实验,例如过氧化氢分解速率与活化能的测定[1]、蔗糖水解反应速率常数的测定[2]、苯酚的光降解速率常数[3]等。化学动力学模拟(Chemical kinetics simulation)是根据化学反应动力学基本原理,运用数学方法实现对反应体系中各种化学物质浓度随反应时间变化过程的模拟,不仅能用来评估反应效率,还能帮助深入理解反应机理和获得特定反应的动力学常数。化学动力学模拟在诸多化学反应研究中得到广泛应用,而且也被用在一些化学类理论课教学中[4][5]。而环境化学教学中涉及的反应体系(如光化学烟雾、臭氧层损耗、高级氧化等)比大学化学或物理化学课程讲授的反应体系更为复杂,更需要利用化学动力学模拟工具辅助教学活动。但是,将传统化学实验与计算机模拟结合起来用于环境化学综合性实验的教学设计鲜有报道。

本文根据 Fenton 反应产生羟基自由基($\cdot\text{OH}$)及其与苯发生反应的机理,查阅文献获得体系中各反应的速率常数,运用基于 METLAB 的 SimBiology 软件工具构建动力学模拟系统[6],实现对反应物和产物浓度进行计算;同时在一定实验条件下实际测定反应物 Fe^{2+} 和主要产物苯酚的浓度,并用实验值对模拟计算值进行检验,实现了实验测试与计算模拟相结合的环境化学反应动力学综合性实验教学设计。

2. 实验原理

2.1. 反应动力学模拟

根据质量作用定律,化学反应速率与反应物的浓度成正比。对于基元反应 $\text{A} + \text{B} \rightarrow \text{产物}$,其反应速率可以表示为:

$$r = \frac{d[\text{A}]}{dt} = \frac{d[\text{B}]}{dt} = k[\text{A}][\text{B}]$$

式中 k 为反应速率常数, $[\text{A}]$ 和 $[\text{B}]$ 分别表示反应物 A 和 B 的浓度。对于复杂反应体系,如果清楚反应机理(即各个反应及其速率常数是已知的),通过上述的质量作用定律和常微分方程,即可构建体系反应动力学模型来模拟反应进程。反过来,也可以利用反应动力学模拟推断反应机理。

2.2. Fenton 体系

本实验设计选取 Fenton 反应体系的理由有三点:第一,它是一个产生 $\cdot\text{OH}$ 的经典反应。在水环境化学、环境光化学、污染控制化学(高级氧化技术)等环境化学理论课教学内容中都会涉及 Fenton 反应。第二,如表 1 所列, Fenton 反应产生 $\cdot\text{OH}$ 只是初级反应(反应 1),其反应体系中还涉及多个次级反应(反应

2~9)。前人对这些反应研究较为充分,其速率常数已有报道。对于本科生教学而言,通过对这些反应的了解才能够帮助学生全面认识整个 Fenton 反应体系。第三, Fenton 反应所需的实验条件简单,仅需要烧杯、搅拌器、可见分光光度计、 Fe^{2+} 、 H_2O_2 等,在本科生教学实验中易于实现。

反应选取依据以下三条原则: (1) 主路径优先,即必须包含 $\cdot\text{OH}$ 的产生反应(反应 1)和苯的初始氧化反应(反应 10); (2) 关键消耗与竞争路径,必须包含 $\cdot\text{OH}$ 的主要清除反应,包括与 Fe^{2+} (反应 2)、 H_2O_2 (反应 3)以及产物苯酚(反应 20)的竞争反应; (3) 次级自由基的循环与转化,需纳入 $\text{HO}_2\cdot$ 的生成与转化反应(反应 4~9)以及苯加成自由基($\cdot\text{C}_6\text{H}_6\text{OH}$)的主要反应(反应 11~17)。此外,体系中 H^+ 与 OH^- 的快速中和反应(反应 18)以及 $\text{O}_2^{\cdot-}$ 的质子化反应(反应 19)因速率极快,对维持 pH 和自由基形态分布有重要影响,也予以保留。对于未纳入的反应(如 Fe^{3+} 与有机中间体的络合反应等),因其在低浓度有机物条件下对主路径物种浓度的影响可忽略,故予以简化剔除。

Table 1. Main reactions and rate constants in the Fenton system with benzene as substrate
表 1. 以苯为底物的 Fenton 反应体系中主要反应及其反应速率常数

序号	反应	反应速率参数($\text{L}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$)	参考文献
1	$\text{Fe}^{2+} + \text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow \text{Fe}^{3+} + \cdot\text{OH} + \text{OH}^-$	63	[7]
2	$\text{Fe}^{2+} + \cdot\text{OH} \rightarrow \text{Fe}^{3+} + \text{OH}^-$	3×10^8	[7]
3	$\text{H}_2\text{O}_2 + \cdot\text{OH} \rightarrow \text{HO}_2\cdot + \text{H}_2\text{O}$	3.3×10^7	[7]
4	$\text{Fe}^{3+} + \text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow \text{Fe}^{2+} + \text{HO}_2\cdot + \text{H}^+$	0.003	[7]
5	$\text{Fe}^{2+} + \text{HO}_2\cdot + \text{H}^+ \rightarrow \text{Fe}^{3+} + \text{H}_2\text{O}_2$	1.2×10^6	[7]
6	$\text{Fe}^{3+} + \text{HO}_2\cdot \rightarrow \text{Fe}^{2+} + \text{O}_2 + \text{H}^+$	1×10^3	[7]
7	$2 \text{HO}_2\cdot \rightarrow \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O}_2$	8.3×10^5	[7]
8	$\cdot\text{OH} + \text{HO}_2\cdot \rightarrow \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O}$	7.1×10^9	[7]
9	$2 \cdot\text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2$	5.2×10^9	[7]
10	$\text{C}_6\text{H}_6 + \cdot\text{OH} \rightarrow \cdot\text{C}_6\text{H}_6\text{OH}$	7.6×10^9	[8]
11	$\cdot\text{C}_6\text{H}_6\text{OH} + \text{O}_2 \rightarrow \text{C}_6\text{H}_6(\text{OH})\text{O}_2\cdot$	1.5×10^8	[9]
12	$\cdot\text{C}_6\text{H}_6\text{OH} + \text{O}_2 \rightarrow \text{HOC}_6\text{H}_6\text{O}_2\cdot$	1.5×10^8	[9]
13	$\text{C}_6\text{H}_6(\text{OH})\text{O}_2\cdot \rightarrow \text{C}_6\text{H}_5\text{OH} + \text{HO}_2\cdot$	$2 \times 10^4 \text{ s}^{-1}$	[9]
14	$\text{HOC}_6\text{H}_6\text{O}_2\cdot + \text{OH}^- \rightarrow \text{C}_6\text{H}_5\text{OH} + \text{O}_2^{\cdot-} + \text{H}_2\text{O}$	1.2×10^5	[9]
15	$\text{HOC}_6\text{H}_6\text{O}_2\cdot \rightarrow \text{HOC}_6\text{O}_2\text{H}_6\cdot$	$5 \times 10^2 \text{ s}^{-1}$	[9]
16	$2\text{HOC}_6\text{H}_6\text{O}_2\cdot \rightarrow \text{product}$	8×10^8	[9]
17	$\cdot\text{C}_6\text{H}_6\text{OH} + \text{O}_2 \rightarrow \text{C}_6\text{H}_5\text{OH} + \text{HO}_2\cdot$	6×10^6	[9]
18	$\text{H}^+ + \text{OH}^- \rightarrow \text{H}_2\text{O}$	1×10^{11}	扩散速率
19	$\text{O}_2^{\cdot-} + \text{H}^+ \rightarrow \text{HO}_2\cdot$	5×10^{10}	[10]
20	$\text{C}_6\text{H}_5\text{OH} + \cdot\text{OH} \rightarrow \text{product}$	1.4×10^{10}	[11]
21	$\text{C}_6\text{H}_6(\text{aq}) \rightarrow \text{C}_6\text{H}_6(\text{g})$	正/反: 0.004 s^{-1}	本文模拟

反应速率常数如表 1 所示,反应 1~20 的速率常数均引自经典动力学研究。反应 21 为苯的液-气挥发过程,在本实验体系中,苯的挥发是一个不可忽略的物理消除过程,为将该过程纳入动力学模型,通过预实验数据估算得到:在未加入 H_2O_2 的对照实验中(即无 Fenton 氧化反应),仅测定苯浓度随时间的衰减,将苯浓度取自然对数后对时间进行线性拟合,所得斜率即为苯在该实验条件下的表观挥发速率常数。本实验条件下的拟合结果为 $k_{21} = 0.004 \text{ s}^{-1}$ ($R^2 = 0.98$),该值具有明确的实验条件依赖性(受搅拌速率、气

液接触面积、温度等因素影响), 仅适用于本实验条件, 不具备普适性。

2.3. 苯与·OH 的反应

在环境化学理论课内容中涉及到·OH 的反应特性, 尤其要讲解非甲烷烃(烯烃与芳烃)与·OH 的反应。本实验设计选择了·OH 与苯(C₆H₆)的氧化反应, 具有三个优点: 其一, 有利于表现·OH 的反应特性。·OH 与有机物主要发生加成反应(进攻不饱和键)和提氢反应(进攻 α-H 原子)。而苯与·OH 的初级反应相对简单, 仅需要考虑加成反应。其二, 反应的路径比较清楚。苯与·OH 的加成反应(反应 10)形成过渡态加成产物(C₆H₆OH), 再通过多个次级反应途径(反应 11~17)最终形成稳态产物苯酚(C₆H₅OH)。其中的次级反应研究较为充分, 速率常数已知或可以估算[11]。这样有利于构建完整的反应动力学模型。其三, 产物苯酚的测定比较容易。在本科生教学实验中采用液相色谱-紫外检测器就能快速准确测定体系中产生的苯酚, 有利于实现实验值与模拟值的一致性检验。

3. 实验方法

3.1. 试剂

本实验使用的实验试剂列于表 2 中。

Table 2. Chemical reagents

表 2. 实验试剂

试剂名称	分子式	纯度	生产厂家
七水合硫酸亚铁	FeSO ₄ ·7H ₂ O	分析纯	国药集团化学试剂
氢氧化钠	NaOH	分析纯	成都市科隆化学品
浓硫酸	H ₂ SO ₄	分析纯	国药集团化学试剂
浓盐酸	HCl	分析纯	国药集团化学试剂
甲醇	CH ₃ OH	色谱纯	赛默飞世尔科技
过氧化氢	H ₂ O ₂	优级纯	上海沃凯生物科技
苯	C ₆ H ₆	分析纯	上海沃凯生物科技
1,10-邻菲罗啉	C ₁₂ H ₈ N ₂	分析纯	毕得医药
乙酸铵	CH ₃ COONH ₄	分析纯	国药集团化学试剂
苯酚	C ₆ H ₆ O	分析纯	国药集团化学试剂
乙酸	CH ₃ COOH	分析纯	太仓沪试试剂

3.2. 仪器

本实验使用的实验仪器列于表 3 中。

Table 3. Experimental instruments

表 3. 实验仪器

主要仪器名称	生产厂家
AY120 电子天平	Shimadzu, 日本
pHS-3C 型 pH 计	杭州奥立龙仪器
UV-1601 紫外-可见分光光度计	Shimadzu, 日本
DF-101S 集热式恒温加热磁力搅拌器	武汉德力祥仪器设备
赛默飞 U3000 高效液相色谱仪	赛默飞世尔科技
18 MΩ·cm 纯水系统	武汉优普仪器设备

3.3. 实验操作

3.3.1. 反应溶液配制与反应的启动

Fenton 反应在 500 mL 烧杯中进行(如有必要,可以附加控温装置)。分别配制 Fe^{2+} 离子储备液(25 mmol/L), H_2O_2 储备液(100 mmol/L)和苯储备液(10 mmol/L)。各储备液在实验开始前配制。开始反应前,配制 250 mL 反应液,依次加入苯储备液、 Fe^{2+} 离子储备液,调节 pH 为 3.0,再加入 H_2O_2 储备液,得到苯浓度为 1 mmol/L、 Fe^{2+} 离子浓度为 10 $\mu\text{mol/L}$ 、 H_2O_2 浓度为 100 $\mu\text{mol/L}$ 以及 pH 为 3.0 的反应液。用移液枪分别于 0 min、1 min、2 min、5 min、10 min、20 min、30 min 取样用于检测。实验重复两次。

3.3.2. 高效液相色谱法测定苯酚浓度

液相色谱测定条件为: C18 反相色谱柱,流动相甲醇/水(v:v = 65:35),流速 1.0 mL/min,进样体积 100 μL ,检测波长 270 nm,保留时间为 4.03 min。苯酚标准系列溶液浓度分别为 0 $\mu\text{mol/L}$ 、10 $\mu\text{mol/L}$ 、20 $\mu\text{mol/L}$ 、30 $\mu\text{mol/L}$ 、40 $\mu\text{mol/L}$ 、50 $\mu\text{mol/L}$,标准曲线方程为 $y = 0.1462x - 0.0159$ ($R^2 = 0.99995$)。Fenton 体系反应过程中取样 4.5 mL 样品于盛有 0.5 mL 5%盐酸用作反应终止剂的 10.0 mL 离心管中,摇匀。按照标准系列测试方法测定反应样品中苯酚浓度。每组实验重复两次。

3.3.3. 邻菲罗啉分光光度法测定 Fe^{2+} 浓度

首先,在 10 mL 的比色管中加入 2 mL 的邻菲罗啉(1 g/L)和 2 mL 乙酸-乙酸铵缓冲溶液,加入 5 mL 待测液,稀释定容至 10 mL,摇匀。静置 10 min 后,将样品转移至 5 cm 石英比色皿中。使用紫外-可见分光光度计记录样品在 510 nm 处的吸光度。Fenton 反应过程中样品 Fe^{2+} 浓度的测定与标准系列相同。实验重复两次。

由 2 名学生组成小组,开展上述反应与测定实验,其中配制溶液 30 min,反应 30 min,液相色谱和分光光度计测试可在反应结束后 30~60 min 内完成。此部分化学实验操作可在 3 课时内完成,后续计算机模拟可在 1 课时内完成,整个实验的时间设计为 4 课时,适合综合性实验的课时安排。

3.3.4. SimBiology 软件操作

(1) 打开 MATLAB R2022a 软件,选择 app 中 SimBiology Model Builder 工具进入模型建立模块。

(2) 反应动力学模型的建立。

1) 在 SimBiology 的选项卡中选择 Model > Create New Blank Model,并将其命名,此时显示一个未命名的空的反应体系,并在图表选项中显示参数。

2) 拖动物种和反应节点到反应体系中,双击可命名。

3) 在添加反应物、反应节点和生成物后,按住 Ctrl 键并选择所需添加反应的物种,将其与对应的反应节点相连。

4) 单击“反应节点”以查看“属性编辑器”窗格中的其属性,设置参数 Value。若反应为可逆反应,则将 REVERSIBLE 中的 false 改为 true 后设置正逆反应参数;设定反应中物质的初始浓度以及其反应速率常数 k。

(3) 执行模拟任务。

1) 在主页上面点击模型分析,或者打开 SimBiology Model Analyzer。

2) 在模型分析器应用程序中,在“主页”选项卡上选择“program” > “Simulate Model”。

3) 在程序的“模拟”步骤中,设置“停止时间”。单击“主页”选项卡中的“运行”。若需要进行敏感性分析则添加敏感性分析并将所要分析的物种以及反应输入。

4) 点击“Run”按钮运行模型后,即可模拟出给定时间内体系中不同物种浓度的变化情况,通过在

页面右侧“Property Editor”，可以有针对性地选择体系中某些物种的浓度变化进行展示。此外，不同物种随时间的浓度模拟值也被储存在 Last run 文件夹中，右键点击“Export Data to MATLAB Workspace”可以将该模拟结果导出至 MATLAB 工作区用以后续模型分析。

4. 实验结果与讨论

4.1. 模型准确性

将 Fe^{2+} 和苯酚的实验数据与模型计算数据，按照斜率为 1 进行线性回归，分别得到相关系数 R^2 为 0.869 和 0.956，表明两者的实验值与模型值具有显著的相关性(如图 1 所示)。采用均方根误差(RMSE)和归一化均方根误差(NRMSE)评价模型预测的准确性(模拟值与计算值的一致性)。经过统计分析，分别得到 NRMSE 为 0.137 (Fe^{2+}) 和 0.112 (苯酚)，接近 0.1，表明模型计算准确性良好。模型对于苯酚的模拟结果准确性优于 Fe^{2+} ，可能与测量误差或各反应的速率常数取值有关，通过调整模型参数，可进一步优化模拟结果与实验值的一致性。

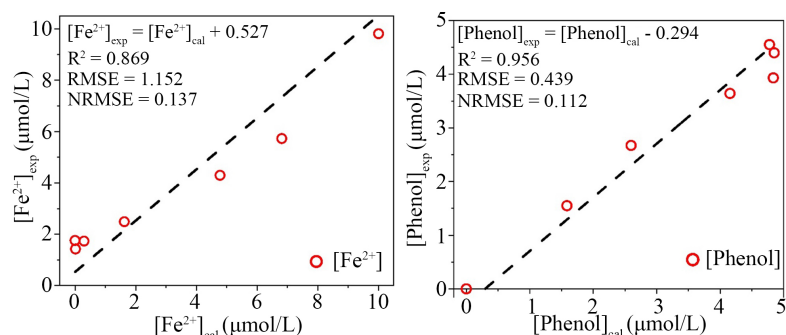


Figure 1. Comparison between simulated and experimental concentrations of Fe^{2+} and phenol
图 1. Fe^{2+} 和苯酚浓度模拟值与实验值一致性检验图

4.2. 模型敏感性

SimBiology 软件给出了反应动力学模型对 Fe^{2+} 和苯酚模拟的敏感性分析结果。对 Fe^{2+} 的消耗来说，Fenton 反应(1)敏感性远远高于其他反应，占绝对优势；其次敏感性由高到低排序的前 5 个反应分别是苯的挥发(21)、 Fe^{3+} 与 $\text{HO}_2\cdot$ 的反应(6)、 $\text{HO}_2\cdot$ 的复合反应(7)、苯酚与 $\cdot\text{OH}$ 的反应(20)和苯与 $\cdot\text{OH}$ 的反应(10)。这说明 Fe^{2+} 的消耗既受到 $\cdot\text{OH}$ 的清除反应的影响，又受到次级自由基 $\text{HO}_2\cdot$ 转化反应的影响。

对苯酚的生成来说，苯- $\cdot\text{OH}$ 加合物与 O_2 的结合形成过氧自由基反应(11 与 12)和 Fenton 反应(1)具有主要的敏感性；其次敏感性由高到低排序的前 3 个反应分别是苯的挥发(21)、苯酚与 $\cdot\text{OH}$ 的反应(20)和苯与 $\cdot\text{OH}$ 的反应(10)。这说明苯被 $\cdot\text{OH}$ 氧化主要受到 $\cdot\text{OH}$ 的产生与消除反应的影响。苯- $\cdot\text{OH}$ 加合物与 O_2 反应的另外一个途径是直接生成苯酚和 $\text{HO}_2\cdot$ (17)，该反应对苯酚生成的敏感性远低于反应 11 和 12，说明该途径是次要的，苯酚的形成主要是通过过氧自由基中间态实现的。这一点对于认识苯被 $\cdot\text{OH}$ 氧化的机制很重要。

4.3. 教学应用设计与评价

4.3.1. 教学目标与评价

本实验为环境化学综合性实验，设定以下三项学习目标：(1) 知识层面：让学生理解 Fenton 反应产生 $\cdot\text{OH}$ 的机理，掌握 $\cdot\text{OH}$ 与芳香烃反应的基本规律，熟悉反应速率常数在动力学模拟中的核心作用；(2) 技能层面：掌握紫外-可见分光光度法和高效液相色谱法的基本操作，能够独立使用 SimBiology 软件构

建简单反应动力学模型；(3) 思维层面：形成“实验－模型－机制验证”的研究思维，能够通过模拟与实验的对比识别关键反应路径。学生评价采用过程与结果评价相结合的方式：实验过程中由指导教师现场观察评定(20%)；实验报告从数据完整性与准确性(20%)、模型构建规范性(15%)、思考题作答质量(25%)及分析讨论深度(20%)等方面综合评分。

4.3.2. 思考题

为引导学生深入思考，可以在实验报告中增设以下思考题：

1、比较 Fe^{2+} 和苯酚的实验值与模拟值，分析二者偏差可能的主要来源(提示：从测量误差、模型简化、速率常数不确定性三个角度分析)。

2、从表 1 中找出对 Fe^{2+} 消耗敏感性最高的三个反应，并解释为什么 Fenton 反应(1)的敏感性远高于其他反应。

3、反应 11、12 和 17 均为苯-OH 加合物与 O_2 的反应，前两者生成过氧自由基，后者直接生成苯酚。根据敏感性分析结果，判断哪条路径对苯酚生成贡献更大？这对理解·OH 氧化芳香烃的机理有何启示？

4、本模型未纳入哪些可能的反应(如 Fe^{3+} 与有机物的络合)？若纳入这些反应，你认为模拟结果会更准确还是更复杂？

4.3.3. 推广应用的限制与挑战

本实验设计在推广至其他院校时需注意以下问题：第一，软件依赖性，SimBiology 需在 MATLAB 环境中运行，对未购置 MATLAB 的院校而言存在软件成本问题，可考虑替代方案如开源软件 COPASI 或 KinSim；第二，时间安排，液相色谱平衡和分析耗时较长，可优化操作步骤以保证 4 课时的可行性，或适当延长课时；第三，速率常数的通用性，表 1 中各速率常数来源于文献报道，部分常数(如反应 21 的挥发常数)具有极强的条件依赖性，在其他实验室条件下不能直接套用，需通过预实验重新标定；第四，学生先修知识要求，本实验要求学生已具备化学动力学基本概念和基本的色谱分析操作技能，可以安排在大三下学期或大四上学期开设。各院校可根据自身条件灵活调整实施方案。

5. 结论

本实验设计以苯作为底物，利用 Fenton 反应体系，通过测定主要反应物和产物浓度变化，并借助 SimBiology 反应动力学模拟软件计算，将化学实验与模型计算结果进行比较，实现了对 Fenton 反应体系和苯与·OH 反应的机制验证。本实验设计具有简单、紧凑、综合性强、难度适中的优点，适于作为本科生环境化学或大学化学综合性实验教学。

基金项目

2024 年武汉大学本科教育质量建设综合改革项目(2024ZG072)。

2025 年武汉大学实验技术项目(WHU-2025-SYJS-029)。

参考文献

- [1] 南京大学化学实验教学组. 大学化学实验[M]. 第 3 版. 北京: 高等教育出版社, 2018: 185-187.
- [2] 毕韶丹, 周丽, 王凯, 王雷, 王昕. 物理化学实验[M]. 北京: 清华大学出版社, 2018: 123-128.
- [3] 董德明, 朱利中. 环境化学实验[M]. 第 2 版. 北京: 高等教育出版社, 2009: 70-73.
- [4] Peng, Z. and Jimenez, J.L. (2019) Kinsim: A Research-Grade, User-Friendly, Visual Kinetics Simulator for Chemical-Kinetics and Environmental-Chemistry Teaching. *Journal of Chemical Education*, **96**, 806-811. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.9b00033>

-
- [5] 陈广慧, 林旺强, 姜昆. 计算模拟在化学热力学、动力学教学实践中的应用——以甲醛解离反应为例[J]. 大学化学, 2020, 35(12): 143-149.
- [6] Sun, T. and Zhao, Z. (2023) Teaching Dynamic Mechanisms in Signaling Pathways Using Computational Simulations. *Education for Chemical Engineers*, **42**, 20-30. <https://doi.org/10.1016/j.ece.2022.11.002>
- [7] Gallard, H., de Laat, J. and Legube, B. (1998) Influence du pH sur la vitesse d'oxydation de compose's organiques par $\text{Fe}^{II}/\text{H}_2\text{O}_2$. Me'canismes re'actionnels et mode'lisation. *New Journal of Chemistry*, **22**, 263-268. <https://doi.org/10.1039/a708335a>
- [8] Kochany, J. and Bolton, J.R. (1992) Mechanism of Photodegradation of Aqueous Organic Pollutants. 2. Measurement of the Primary Rate Constants for Reaction of Hydroxyl Radicals with Benzene and Some Halobenzenes Using an EPR Spin-Trapping Method Following the Photolysis of Hydrogen Peroxide. *Environmental Science & Technology*, **26**, 262-265. <https://doi.org/10.1021/es00026a004>
- [9] Pan, X., Schuchmann, M.N. and von Sonntag, C. (1993) Oxidation of Benzene by the OH Radical. A Product and Pulse Radiolysis Study in Oxygenated Aqueous Solution. *Journal of the Chemical Society, Perkin Transactions 2*, **22**, 289-297. <https://doi.org/10.1039/p29930000289>
- [10] Ilan, Y. and Rabani, J. (1976) On Some Fundamental Reactions in Radiation Chemistry: Nanosecond Pulse Radiolysis. *International Journal for Radiation Physics and Chemistry*, **8**, 609-611. [https://doi.org/10.1016/0020-7055\(76\)90030-9](https://doi.org/10.1016/0020-7055(76)90030-9)
- [11] Land, E.J. and Ebert, M. (1967) Pulse Radiolysis Studies of Aqueous Phenol. Water Elimination from Dihydroxycyclohexadienyl Radicals to Form Phenoxyl. *Transactions of the Faraday Society*, **63**, 1181-1190. <https://doi.org/10.1039/tf9676301181>