

利用試算表平衡化學反應式的係數

李景智

雲林縣斗六國民中學

一、前言

在教科書中提到平衡化學反應式的方法，大致上有觀察法、代數法、氧化數法、半反應式平衡等方法，在平衡簡單的化學反應式時，使用到教科書中提到的方法就可以迎刃而解。不過對於一些相當複雜的化學反應式，利用電腦來幫忙計算與平衡，相信能減少計算上的錯誤。在 J. Chem. Education 中有幾篇文章探討到如何利用電腦來平衡化學反應式，例如利用 Mathematica 或 Maple 等軟體來平衡化學反應式。不過 Mathematica 和 Maple 等軟體在國中、高中的電腦教室是很少被使用的，因此本篇文章在介紹一般電腦都有安裝的應用軟體 - 試算表，利用試算表來平衡化學反應式。

二、如何利用試算表平衡化學反應式的係數

作者先介紹利用試算表平衡簡單的化學反應式，當了解操作原則後，再利用試算表平衡一個複雜的化學反應式。

(一)從平衡化學反應式 $\text{H}_2\text{O} = \text{H}_2 + \text{O}_2$ 談起

1. 用 x 、 y 、 z 等未知數表示平衡係數， $x\text{H}_2\text{O} = y\text{H}_2 + z\text{O}_2$
2. 根據物質發生化學反應前後（不包括核反應），原子的種類、原子的個數不變，我們

用聯立方程組來表示

$$\begin{cases} H\text{元素}: 2x = 2y \\ O\text{元素}: x = 2z \end{cases}$$

3. 目前有三個未知數，但是只有兩個方程式，為了滿足 n 個未知數必須有 n 個方程式才能解的條件，於是我們假設 $x=1$ ，將方程組重新整理如下：

$$\begin{cases} H\text{元素}: 2x - 2y = 0 \\ O\text{元素}: x - 2z = 0 \\ \text{假設值}: x = 1 \end{cases}$$

4. 建立試算表來表示方程組，如圖 1。在第一列的儲存格內填上未知數的符號與常數項；在第一行的儲存格內填上元素的種類與假設值，使未知數的個數與第一行考慮的因素有一樣的個數。然後方程組，依序在儲存格中填入適當的數字。

	A	B	C	D	E	F
1		x係數	y係數	z係數	常數項	
2	H元素	2	-2	0	0	
3	O元素	1	0	-2	0	
4	假設值	1	0	0	1	

圖1 試算表操作圖

5. 在 G2 儲存格建立函數功能 $=\text{MMULT}(\text{MINVERSE}(\text{A2:C4}), \text{D2:D4})$ ，選定 G2 : G4 儲存格，按下 F2 的功能鍵，然後再同時按下 CTRL + SHIFT + ENTER 三個鍵，如圖 2。

G4							=MMULT(MINVERSE(B2:D4),E2:E4)	
1	A	B	C	D	E	F	G	
2		x係數	y係數	z係數	常數項			
3	H元素	2	-2	0	0	x=	1	
4	O元素	1	0	-2	0	y=	1	
5	假設值	1	0	0	1	z=	0.5	

圖 2 試算表操作圖

6. 我們不希望平衡係數是以分數、小數來表示，因此調整假設值 $x=2$ ，如圖 3。

G2							=MMULT(MINVERSE(B2:D4),E2:E4)	
1	A	B	C	D	E	F	G	
2		x係數	y係數	z係數	常數項			
3	H元素	2	-2	0	0	x=	2	
4	O元素	1	0	-2	0	y=	2	
5	假設值	1	0	0	2	z=	1	

圖 3 試算表操作圖

最後平衡結果為： $2\text{H}_2\text{O} = 2\text{H}_2 + 1\text{O}_2$

(二) 試平衡化學反應式： $\text{Cu}^{2+} + \text{e}^- = \text{Cu}$

1. 用 x 、 y 、 z 等未知數表示化學反應式的係數， $x\text{Cu}^{2+} + ye^- = z\text{Cu}$
2. 直接從化學反應式中原子的種類、原子的個數、電荷，在儲存格中填入適當的值，因此我們考慮 Cu 原子、電荷、假設值三項因素來平衡，化學式中的原子個數不管是反應物或者是生成物皆以正值表示，正電荷以正值來填儲存格，負電荷以負值來填儲存格，如圖 4。

E4							=1	
1	A	B	C	D	E	F	G	
2		x	y	z	常數項			
3	Cu	1	0	1	0	x=		
4	電荷	2	-1	0	0	y=		
5	假設值	1	0	0	1	z=		

圖 4 試算表操作圖

3. 在 F2 儲存格建立函數功能 =MMULT(MINVERSE(B2:D4),E2:E4)，按下

F2 的功能鍵，然後再同時按下 CTRL + SHIFT + ENTER 三個鍵，如圖 5。

G4							=MMULT(MINVERSE(B2:D4),E2:E4)	
1	A	B	C	D	E	F	G	
2		x	y	z	常數項			
3	Cu	1	0	1	0	x=	1	
4	電荷	2	-1	0	0	y=	2	
5	假設值	1	0	0	1	z=	-1	

圖 5 試算表操作圖

最後得到平衡結果： $1\text{Cu}^{2+} + 2\text{e}^- = 1\text{Cu}$

(三) 利用試算表平衡化學反應式的原則

由以上的操作，我們歸納出心得如下：

1. 在試算表第一列的儲存格內先填未知係數的代號與常數項。
2. 在試算表第一行的儲存格內填上考慮的條件。它要滿足有 n 個未知數就要有 n 項考慮條件，其中假設值一定要先考慮，其餘考慮電荷、元素種類，注意考慮條件一定要等於未知數個數，因為 MINVERSE 函數要求為 n 階方陣。
3. 根據化學式，對照第一行與第一列的要求，在儲存格內填入適當的數字。
4. 在考慮電荷時，正電荷以正值表示，負電荷以負值表示。
5. 假設值的常數項先設為 1，即 $X = 1$ ，最後調整假設值使所有的未知數皆成為整數，如此才符合道耳吞的原子說中「原子不可再分割」的要求。
6. 未知數的值為正數時，表示在化學反應式的左邊，是為反應物，未知數的值為負數時，

表示在化學反應式的右邊，是為生成物。

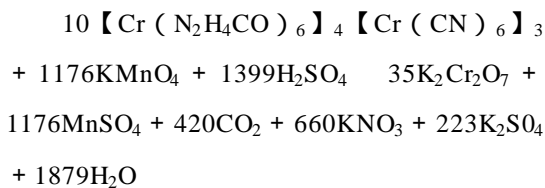
(四)自我挑戰

試平衡化學反應式： $10 \text{Cr}(\text{N}_2\text{H}_4\text{CO})_6 + 4 \text{Cr}(\text{CN})_6 + 3 \text{KMnO}_4 + \text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow \text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7 + \text{MnSO}_4 + \text{CO}_2 + \text{KNO}_3 + \text{K}_2\text{SO}_4 + \text{H}_2\text{O}$
 ，其操作結果如圖 6。

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1		x	y	z	t	u	v	w	n		常數項		
2	Cr	7	0	0	2	0	0	0	0	0	0	w=	10
3	N	66	0	0	0	0	0	1	0	0	0	y=	1176
4	H	96	0	2	0	0	0	0	0	2	0	z=	1399
5	C	42	0	0	0	0	1	0	0	0	0	t=	-35
6	O	24	4	4	7	4	2	3	4	1	0	u=	-1176
7	K	0	1	0	2	0	0	1	2	0	0	v=	-420
8	Mn	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	w=	-660
9	S	0	0	1	0	1	0	0	1	0	0	n=	-223
10	假設值	1	0	0	0	0	0	0	0	0	10	t=	-1879

圖 6 試算表操作圖

最後得到平衡結果：



三、試算表平衡化學反應式的原理與操作說明

矩陣的運算包括行列式求值、反矩陣運算、利用克拉瑪法則解多階的聯立方程組。矩陣一般有 N 行 M 列，因此在試算表的工作中是以區域的方式儲存，稱為陣列，也就是儲存格的選取範圍，數學上的「矩陣」與試算表上的「陣列」意義相同。進行矩陣的運算時，我們所得到的結果也是一個「陣列」時，則我們必須以「陣列」的方式輸入相關的公式或函數，最後要產生結果時，以 Ctrl+Shift+Enter 之組合鍵來輸入。

其中 MINVERSE(陣列)是傳回一陣列的反矩陣，該陣列必須是個數值方陣(N×N 陣

列)，也就是說必須是行數與列數都相同的資料區域。任一方陣與其反矩陣的乘積，就是個「單位矩陣」，也就是說原矩陣為 A，反矩陣為 A^{-1} ，則 $A \times A^{-1}$ 為單位矩陣。由於 MINVERSE(陣列)函數傳回的值也是為一矩陣，故需以多儲存格區域以陣列的方式來接受傳回的值。

MMULT(陣列 1, 陣列 2)是傳回兩矩陣的乘積，所得的結果也是個矩陣，其列數與第一個矩陣相同，欄數則是與第二個矩陣相同。兩陣列數可以是個區域範圍、陣列常數或參考位址。也就是說，假設 A 矩陣為 $N \times M$ (矩陣 $A_{n \times m}$)，B 矩陣為 $M \times K$ (矩陣 $A_{m \times k}$)，則 $A \times B$ 為一 $N \times K$ 之 C 矩陣。

$$A_{n \times m} \times B_{m \times k} = C_{n \times k}$$

我們以試算表解三元一次方程組，

$$\begin{cases} x + 2y - z = -3 \\ 2x - y + z = 5 \\ 3z + 2y - z = -1 \end{cases} \text{ 來對操作介面做說明。}$$

	A	B	C	D	E	F	G
1	x的係數	y的係數	z的係數	常數項			
2	1	2	-1	-3		x=	1
3	2	-1	1	5		y=	-1
4	3	2	-1	-1		z=	?

圖 7 試算表操作圖

如圖 7 G2 儲存格「=MMULT(MINVERSE(A2:C4),D2:D4)」，表示 G2 儲存格的值是經過 MMULT(MINVERSE(係數陣列),常數項陣列)操作後的結果，其中係數陣列是 A2:C4 的儲存格，常數項陣列是 D2:D4 的儲存格。如果係數陣列=A 矩陣，常數項陣列=B 矩陣，則 MINVERSE(係數陣列)的操作結果就是 A

矩陣的反矩陣，以 A^{-1} 表示，所以 MINVERSE (係數陣列) 本身也是陣列，而 MMULT (MINVERSE(係數陣列), 常數項陣列) 則表示為 MINVERSE(係數陣列) 與常數項陣列兩個陣列乘積的結果，數學上就是 A 矩陣的反矩陣與 B 矩陣相乘結果，以 C 矩陣表示，我們則可以發現 $C = A^{-1} \times B$ ，兩邊同乘上 A，則 $A \times C = A \times A^{-1} \times B$ ，其中 $A \times A^{-1} =$ 單位矩陣，所以 $A \times C = A \times A^{-1} \times B = B$ ，因此在試算表上係數陣列 $\times C =$ 常數項陣列，因此證明 C 矩陣就是未知數陣列。

參考資料

1. 林宏諭、林建宏 (民 88): *Excel 2000 中文版應用大全 - 函數剖析*。台北，博碩文化。
2. Glaister, P. (1997): *Challenging Balance*. **J. Chem. Educ.** Vol 74 No 11 p1368.
3. Herndon, William C. (1997): *On Balancing Chemical Equations: Past and Present*. **J. Chem. Educ.** Vol 74 No 11 p1359.
4. Olson, John A. (1997): *An analysis of the algebraic method for balancing chemical reactions*. **Journal of Chemical Education**, Easton, Vol 74 No 5 p538.
5. Smith, William R. Missen, Ronald W. (1997) *Using mathematica and maple to obtain chemical equations*. **Journal of Chemical Education**, Easton, Vol 74 No 11 p1369.
6. Weltin, E. (1994): *Let a computer balance your chemical equations and determine the number of independent reactions*. **Journal of Chemical Education**, Easton; Vol. 71, No 4 p 295.

註：本文整理自李景智九十一年臺師大化研所指導教授：方泰山博士民 91 年 8 月。教學碩士論文“利用試算表平衡化學反應式的教學研究 由資訊融入教學探討多元智慧”。